

Technische Universität Darmstadt
Fachbereich Biologie — Institut für Botanik



ENTWICKLUNG EINES MATHEMATISCHEN MODELLS DER
PHOTOSYNTHESE IN BÄUMEN ALS TEIL EINER
PROZESSORIENTIERTEN SIMULATION DER ISOPRENEMISSION

vom Fachbereich Biologie der Technischen Universität Darmstadt zur
Erlangung des akademischen Grades eines

Doctor rerum naturalium

genehmigte Dissertation von

Steffen Manfred Noe

aus Laudenbach

Berichterstatter (1. Referent): Prof. Dr. Christoph Giersch

Mitberichterstatter (2. Referent): Prof. Dr. Gerhard Thiel

Tag der mündlichen Prüfung: 29.06.2004

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungen	viii
Symbole	ix
Bezeichnungen	x
Danksagungen	xiii
1 Einleitung	1
1.1 Auswirkungen der Isoprenemission auf die Atmosphäre	2
1.2 Die Isoprenoidbiosynthese	3
1.3 Mathematische Modelle zur Vorhersage der Isoprenemission . . .	4
1.4 Zielsetzung	6
1.5 Technische Details	6
2 Photosynthesemodelle – Eine Übersicht	8
2.1 Bausteine der Photosynthesemodelle	9
2.2 Modellklassen	10
2.2.1 Statische und dynamische Modelle	10
2.2.2 Klassifikation	11
3 Die Beschreibung der Blattphotosynthese	14
3.1 Gaswechsel	14
3.1.1 Die Blattleitfähigkeit	15

3.1.2	Die Regulation der Blattleitfähigkeit	16
3.2	Allgemeines Modell der Blattphotosynthese	18
3.3	Biochemisches Assimilationsmodell	19
3.4	Eine mögliche Lösung des c_i -Dilemmas	21
3.5	Diskussion	22
4	Modellbeschreibung, Prozesse	24
4.1	Einleitung	24
4.2	Prozesse und Prozessorientierung	25
4.2.1	Prozesse der Blattphotosynthese	25
4.2.2	Exkursion: Systemanalyse	27
4.3	Systemanalyse der Blattphotosynthese	29
4.3.1	Problembeschreibung	29
4.3.2	Modellzweck	29
4.3.3	Systemgrenze	30
4.3.4	Beschreibung	30
4.3.5	Modelldiagramm	33
5	Die Modellierung der Blattleitfähigkeit	36
5.1	Einleitung	36
5.2	Regulationsfaktoren für das Modell der Blattleitfähigkeit	37
5.2.1	Licht	37
5.2.2	Temperatur	38
5.2.3	Luftfeuchte	38
5.2.4	Wasserdampfdruckdefizit	39
5.3	Regulation der Blattleitfähigkeit durch Umweltfaktoren	40
5.3.1	Modellannahmen der Regulation	40
5.3.2	Abhängigkeit vom Licht	41
5.3.3	Abhängigkeit vom Dampfdruckdefizit	47

5.3.4	Die Berechnung des Dampfdruckdefizits VPD	49
5.3.5	Die Steuerfunktion $G(I, VPD)$	52
5.3.6	Aufbereitung der Eingangsdaten	54
5.4	Das Modell der Blattleitfähigkeit	55
5.4.1	Das Modell mit drei Variablen	56
5.4.2	Modell mit einer Variable	56
5.4.3	Vergleich der beiden Modellansätze	57
5.4.4	Bewertung der beiden Modellansätze	60
5.5	Vergleich zwischen dem Minimum- und dem Produktansatz der Steuerfunktion $G(I, VPD)$	61
5.5.1	Simulationsergebnisse des Vergleichs	61
5.6	Diskussion	63
6	Ein Skelettmodell der Blattphotosynthese	66
6.1	Einleitung	66
6.2	Modellbeschreibung des Skelettmodells	66
6.3	Die Regulation der Carboxylierungsrate	68
6.4	Das Skelettmodell der Blattphotosynthese	71
6.5	Ergebnisse	74
6.5.1	Vergleich zwischen experimentellen Daten und den Simula- tionsergebnissen	74
6.6	Diskussion	78
7	Modellerweiterung Calvin-Zyklus	83
7.1	Einleitung	83
7.2	Modellerweiterung	84
7.2.1	Lichtabhängige Regulation der CO_2 -Fixierung	84
7.2.2	Metabolite des erweiterten Modells	85
7.3	Ergebnisse	89

7.4	Diskussion	92
8	Zusammenfassung	96
9	Anhang	99
9.1	Informationen zu den verwendeten numerischen Lösungsalgorithmen	99
9.1.1	Der CVODE Lösungsalgorithmus	100
9.1.2	Fehlergrenzen des CVODE Algorithmus	101
9.2	Fehlerabschätzung bei der Verwendung kubischer Splines als Ein- gangsdaten	102
9.3	Hinweise zu den verwendeten Messdatensätzen	103
10	Anlagen	113

Abbildungsverzeichnis

4.1	Modelldiagramm.	35
5.1	Parameterschätzung für Hyperbelfunktionen $g_s = f(I)$	43
5.2	Parameterschätzung $\gamma(I)$ für das Jahr 1999.	45
5.3	Parameterschätzung $\gamma(I)$ für das Jahr 2000.	46
5.4	Auswirkung der Parametervariation bei $f = \delta/ VPD ^N$	47
5.5	Parameterschätzung für die Abhängigkeit von VPD	48
5.6	Simulierte Blattleitfähigkeit 1999.	58
5.7	Simulierte Blattleitfähigkeit 2000.	59
5.8	Vergleich verschiedener Steuerfunktionen für g_s	62
5.9	Mittlere Abweichung der modellierten Blattleitfähigkeiten von den Messdaten.	63
6.1	Modelldiagramm des Skelettmodells.	68
6.2	Parameterschätzung mit Dosis-Effekt-Kurven für die Carboxylierungsrate.	70
6.3	Vergleich zwischen Skelettmodell und Messung 1999.	75
6.4	Vergleich zwischen Skelettmodell und Messung 2000.	77
7.1	Tagesverlauf von RuBP, PGA und P_i	90
7.2	Tagesverlauf von TP, Ru5P und ATP/ADP.	91
7.3	Modellierte NADP/NADPH Tagesgänge.	91

Tabellenverzeichnis

5.1	Regressionsergebnisse Hyperbel.	44
5.2	Vergleich der Parameter bei verschiedenen Spezies.	45
5.3	Regressionsergebnisse Reziprokfunktion.	49
5.4	Mittlere relative Luftfeuchte.	50
5.5	Parameter zum Vergleich der Stomamodelle.	60
6.1	Parameter der Carboxylierungsrate.	69
6.2	Variable Parameter des Skelettmodells.	78
6.3	Konstante Parameter des Skelettmodells.	82
7.1	Initialwerte des erweiterten Modells.	92
7.2	Parameter des erweiterten Modells.	95

Mir jedenfalls wird es Spaß machen, Ihnen diese Absurdität darzulegen, denn mich entzückt sie. Also laufen Sie bitte nicht gleich davon, weil Sie die Natur nicht für so seltsam halten können.

Richard P. Feynman

QED: Die seltsame Theorie des Lichts und der Materie.

Abkürzungen

Abkürzungen

ABA	Abscisinsäure
DAE	Differential Algebraic Equation
DHAP	Dihydroxyacetonphosphat
DMAPP	Dimethylallylpyrophosphat
DOXP	1-Deoxy- D-Xylulose-5-Phosphat
GAP	Glycerinaldehydphosphat
GAPD	Glycerinaldehydphosphat-Dehydrogenase
IPP	Isopentenylpyrophosphat
NADPH	Nicotinamidadenindinucleotidphosphat
PAN	Peroxyacetylnitrat
PAR	Photosynthetically Active Radiation
PGA	3-Phosphoglycerat
PGK	Phosphoglyceratkinase
Rubisco	Ribulose-1,5-bisphosphatcarboxylase/oxygenase
Ru5P	Ribulose-5-Phosphat
RuBP	Ribulose-1,5-bisphosphat
TP	Triosephosphat
(B)VOC	(Biogenic) Volatile Organic Compound (Carbon)
VPD	Wasserdampfdruckdefizit

Symbole

Symbole

\mathcal{R}	Körper der reellen Zahlen
$\mathcal{R}^{n \times n}$	n,n-dimensionaler Vektorraum der reellen Zahlen

Bezeichnungen

Bezeichnungen

A	Netto-Assimilationsrate
C_R	Kohlenstofffluss aus der Atmung
g_{max}	maximale Blattleitfähigkeit
g_{min}	minimale Blattleitfähigkeit
g_s	Blattleitfähigkeit
k_g	Zeitkonstante für Änderungen der Blattleitfähigkeit
p_a (c_a)	CO ₂ -Partialdruck in der Atmosphäre (Molenbruch)
p_i (c_i)	CO ₂ -Partialdruck im Blatt (Molenbruch)
P_{atm}	Luftdruck
q	Konversionsfaktor für Fluss \rightarrow Konzentration beim CO ₂ -Partialdruck im Blatt
S	lichtabhängiges biochemisches Signal
v_{car}	lichtabhängige Carboxylaseaktivität der Rubisco
v_f	lichtabhängige Aktivität der RuBP Regenerierung
W	H ₂ O-Blattleitfähigkeit
w	Faktor des Triosephosphatexportes aus dem Chloroplasten

Bezeichnungen (Fortsetzung)

α	Steigung der Licht-Response-Kurve (Blattleitfähigkeit)
θ	Konvexität der Licht-Response-Kurve (Blattleitfähigkeit)
α_c	Steigung der Licht-Response-Kurve (Carboxylierung, Skelett)
θ_c	Konvexität der Licht-Response-Kurve (Carboxylierung, Skelett)
ρ	Rückkopplungsfaktor der Calvin-Intermediate auf die Carboxylierung
A_0	Summe von ATP und ADP
P_0	Gesamtphosphatgehalt
J_{max}	max. Elektronentransportrate
α_J	Steigung der Licht-Response-Kurve (Elektronentransport)
θ	Konvexität der Licht-Response-Kurve (Elektronentransport)
V_{cmx}	max. Carboxylierungsrate
V_{c0}	min. Carboxylierungsrate
α_R	Steigung der Licht-Response-Kurve (Carboxylierung, Erweitert)
θ_R	Konvexität der Licht-Response-Kurve (Carboxylierung, Erweitert)
k_a	Michaelis-Konstante für die Aktivierung der Rubisco durch CO ₂
k_c	Katalytische Michaelis-Konstante für CO ₂
k_o	Katalytische Michaelis-Konstante für O ₂
o_i	Sauerstoffpartialdruck
W_c	Aktivierungszustand der Rubisco
k_r	Michaelis-Konstante für die RuBP-Nutzung bei der CO ₂ -Fixierung
V_{m2}	max. Geschwindigkeit der PGA-Reduktion
k_{m21}, k_{m22}	Michaelis-Konstanten der PGK
k_e	apparente Gleichgewichtskonstante der kombinierten Reduktionsreaktion durch PGK und GAPD

Bezeichnungen (Fortsetzung)

V_{m3}	max. Geschwindigkeit der Triosephosphatreduktion
k_{m3}	Michaelis-Konstante der Triosephosphatreduktion
V_{m4}	max. Geschwindigkeit der Ru5P Phosphorylierung
$k_{m41}, k_{m42}, k_{m43}$	Michaelis-Konstanten der Phosphorylierung
V_{m5}	max. Geschwindigkeit des Phosphattranslokators
k_{m53}, k_{m55}	Michaelis-Konstanten des Phosphattranslokators
TP^c	Triosephosphatkonzentration im Cytoplasma
P_i^c	Phosphatkonzentration im Cytoplasma
k_{m61}, k_{m62}	Michaelis-Konstanten der Photophosphorylierung
V_{m7}	max. Geschwindigkeit der NADPH Bildung
k_{m7}	Michaelis-Konstante für Änderungen im NADPH- <i>pool</i>
κ	Proportionalitätsfaktor für die NADPH Bildung über den Elektronentransport
λ	Rate der NADPH Verbrauchsreaktion

Danksagungen

Ich danke Herrn Prof. Dr. Giersch, dass er mir die Möglichkeit gegeben hat, die Doktorarbeit in seiner Arbeitsgruppe durchzuführen und für die Diskussionen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Herrn Prof. Dr. Thiel für die Übernahme des Koreferates zu dieser Arbeit.

Herrn PD Dr. Wolfgang Zimmer †, der mir, bis zu seinem plötzlichen Tod im August 2002, immer ein geduldiger Ansprechpartner war und mit vielen Vorschlägen, Hinweisen und Diskussionen zu dieser Arbeit beigetragen hat.

Herrn PD Dr. Jörg-Peter Schnitzler und Frau Dipl.-Biol. Sabine Mayrhofer vom IMK-IFU in Garmisch-Partenkirchen, die mich über die gesamte Zeit mit Daten „gefüttert“ haben.

Meiner Frau und meiner Tochter für die Liebe und Geduld, die sie trotz vieler Abende und Wochenenden aufbrachten, an denen ich keine Zeit für sie hatte.

Finanziell wurde diese Arbeit vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BmBF) im Rahmen des Deutschen Atmosphärenforschungsprogrammes (AFO 2000), Teilprojekt BEWA 2000 unterstützt.

Kapitel 1

Einleitung

Biogene Emissionen flüchtiger Organischer Verbindungen (BVOC) sind in den letzten Jahrzehnten immer weiter in das Blickfeld der Forschung geraten. Das Arbeitsgebiet der VOC-Forschung ist stark interdisziplinär geprägt. Es hat sich inzwischen eine weltweite *community* von Forschern aus den verschiedensten Gebieten zusammengefunden. VOC-Emissionen stossen bei Geophysikern, Geo- und Luftchemikern und Meteorologen ebenso auf Interesse wie bei Ökologen, Umweltwissenschaftlern und Pflanzenphysiologen bis hin zu Molekularbiologen. Auch die mathematische Modellierung der beobachteten Prozesse hat in den meisten der genannten Forschungsgebiete eine lange Tradition und so verbindet die VOC-Forschung letztlich alle klassischen Gebiete der Naturwissenschaften.

Die am meisten untersuchten VOCs sind Isopren (2-Methyl-1,3-Butadien, C_5H_8) und die Stoffklasse der Terpene und in geringerem Maße auch Alkohole und Aldehyde. Das Interesse an diesen Stoffen, insbesondere an den Isoprenoiden (Isopren und Terpene) wird klar, wenn man sich die globalen Emissionen dieser Stoffe vor Augen führt. Guenther *et al.* (1995) schätzten ab, dass auf globaler Skala die biogene Isoprenemission die anthropogene bei weitem übertrifft¹. Da

¹Eine Schätzung für das Jahr 2000 ermittelt 146 Tg a⁻¹ jährliche VOC-Emission (http://www.grida.no/climate/ipcc_tar/wg1/207.htm).

die meisten Isopren emittierenden Spezies Bäume sind (Harley *et al.*, 1999), bilden die großen Waldgebiete der Erde meist auch *hot spots* der Isoprenemission. In Europa sind neben der Gattung *Pinus* in den ausgedehnten Wäldern Nordeuropas die Gattungen *Quercus* und *Populus* im Mittel- und Südeuropäischen Raum die Hauptquellen der biogenen Emissionen. Die Isoprenemission ist stark temperaturabhängig. Nach Singsaas und Sharkey (2000) erhöht sich die Isoprenemissionsrate im Bereich von 30°C bis 44°C um das 2.5 fache. Erst oberhalb von 45°C brechen die Emissionsraten drastisch ein. Daher sind auch die tropischen Wälder eine große Quelle biogener VOC-Emissionen.

1.1 Auswirkungen der Isoprenemission auf die Atmosphäre

Nach Harley *et al.* (1999) gibt es im wesentlichen drei Einflüsse der Isoprenemission auf die regionale Luftchemie. Diese sind:

1. die Kontrolle über die troposphärische Ozon- (O_3) und Hydroxylradikalchemie ($\bullet OH$),
2. die Kontrolle über die Bildung organischer Nitrate und
3. die Kontrolle über die Deposition organischer Säuren in der Umwelt.

Das emittierte Isopren hat in der Atmosphäre eine Verweildauer von 1-2 Stunden. Wegen der Doppelbindungen ist Isopren ein sehr reaktiver Stoff und kann mit vielen Komponenten der unteren Atmosphäre reagieren. Der wichtigste Reaktionspartner sind dabei OH-Radikale. Die Oxidationsprodukte des Isoprens bilden eine ganze Palette von organischen Peroxyradikalen (RO_2) welche die Bildung von organischen Säuren und Ozon bewirken.

Die Bildung von troposphärischem Ozon und weiterer Schadstoffe, wie etwa Peroxyacetylnitrat (PAN) und organischer Säuren, wird durch hohe NO_x -Gehalte

der Luft und einer Strahlung mit ausreichend kleiner Wellenlänge ($h\nu < 420$) begünstigt. In Gebieten mit geringem NO_x -Gehalt der Luft wird Ozon hingegen über Oxidationsreaktionen abgebaut.

Aufgrund der oben genannten Verweildauer des Isoprens in der Atmosphäre bildet es zunächst ein regionales Phänomen. Da die Reaktionspartner der Isoprenabbauprodukte wie NO_x über weite Strecken in der Luft transportiert werden, entstehen Oxidationsprodukte wie Ozon nicht nur in Gebieten mit hohen NO_x -Gehalten sondern auch in Gebieten mit geringen primären NO_x -Quellen. Ähnliche Driftsituationen betreffen die gebildeten Schadstoffe. Bei niedrigen Temperaturen sind PANs zum Beispiel relativ stabil und werden weit transportiert und verteilt. Durch trockene (Absinken der Partikel) oder nasse (Regen) Deposition gelangen diese, zum Teil toxischen Substanzen wieder in den Boden. Speziell PAN wird bei Erwärmung wieder zu NO_x abgebaut und trägt auf diese Art und Weise wieder zur Verteilung von NO_x bei. Durch diese Verteilmechanismen werden auch die Ausgangsstoffe zur Bildung organischer Säuren und letztlich dem „sauren Regen“ dissipiert.

Speziell die Problematik zwischen Isoprenemissionen und der Bildung von Luftschadstoffen hat das Interesse an Instrumenten zur Vorhersage der möglichen Luftbelastungen geweckt. In diesem Zusammenhang sind daher schon Modelle zur Abschätzung der globalen und regionalen Isoprenemissionen entstanden. Diese Modelle werden in einem fortschreitenden Prozess verfeinert und weiterentwickelt.

1.2 Die Isoprenoidbiosynthese

Die Synthese der Isoprenoide in Pflanzen findet auf zwei alternativen Wegen statt. Der ältere bekannte Weg ist die Bildung des C_5 -Vorläuferstoffes Isopentenylpyrophosphat (IPP) über den Mevalonsäureweg im Cytosol der Blätter. Lichtenthaler *et al.* (1997) haben nachgewiesen, dass es einen alternativen Syntheseweg für IPP im Chloroplasten bei höheren Pflanzen gibt. Dieser, nach dem auftretenden Inter-

mediat 1-Deoxy- D-Xylulose-5-Phosphat (DOXP) benannte Reaktionsmechanismus, findet unter Verbrauch von NADPH und ATP im Chloroplasten statt und bildet dort IPP und über Dimethylallylpyrophosphat (DMAPP) Isopren (Logan *et al.*, 2000). Nach Lichtenthaler *et al.* (1997) wird das Isopren im Chloroplasten gebildet während weitere Isoprenoide Stoffe (Terpene) im Cytosol gebildet werden.

In beiden Fällen dienen die photosynthetisch aufgebauten Kohlenstoffskelette als Ausgangsstoffe. Insbesondere sind hier die Triosephosphate zu nennen, die zu Pyruvat umgebildet zusammen mit Glycerinaldehydphosphat (GAP) die Ausgangsstoffe der Isoprenoidbiosynthese bilden. Um eine aussagekräftige Vorhersage über die VOC-Emissionen zu machen ist es notwendig, gute Abschätzungen der Photosyntheseleistung von Bäumen oder ganzen Baumbeständen zu ermitteln.

1.3 Mathematische Modelle zur Vorhersage der Isoprenemission

Neben den „meteorologischen“ Modellen, die Verdriftung der emittierten VOCs und deren Abbauprodukte beschreiben, existieren luftchemische Modelle, die Emission und Deposition von VOCs und deren Reaktionsprodukten berechnen. Solche Modelle dienen meist der globalen oder regionalen Schadstoffvorhersage und basieren unter anderem auf Daten über biogene Emissionen. Aus diesem Kontext heraus sind Emissionsmodelle auf physiologischer Basis entstanden. Guenther *et al.* (1993) beschreibt ein Modell, das aufgrund von Licht und Temperatur die Emissionsfaktoren für Isopren und Monoterpene abschätzt. Allerdings überschätzt dieser Guenther-Algorithmus die gemessenen Emissionsraten in den meisten Fällen, wie Zimmer *et al.* (2000) darlegt. Daher gibt es einen Trend, die Emissionsfaktoren über prozessorientierte Emissionsmodelle zu beschreiben.

Prozessorientierte Emissionsmodelle versuchen in der Regel die der Isoprene-

mission zugrunde liegenden physiologischen Prozesse zu beschreiben. Aus dieser Motivation heraus sind zum Beispiel gekoppelte Photosynthese-Isoprenemissionsmodelle von Martin *et al.* (2000), Niinemets *et al.* (1999, 2002a) und Zimmer *et al.* (2000) entstanden. Diese Modelle zeigen allerdings eine recht breite Variation bei den betrachteten Prozessen. Einige beachten nur die photosynthetische Assimilationsrate als Lieferant für Vorläuferstoffe der Isoprenbiosynthese. Andere beinhalten schon die biochemischen Prozesse der Photosynthese, die mit den physikochemischen Prozessen der Blattleitfähigkeit kombiniert sind. Interessant sind auch neuere Untersuchungen von Niinemets *et al.* (2002b) die auch Effekte der Blattleitfähigkeit auf die Emissionsraten betrachten. Dies zeigt, dass die Entwicklung leistungsfähiger Modelle der Blattphotosynthese positiv auf die Vorhersagemöglichkeiten der Emissionsmodelle wirkt.

Speziell die Arbeit von Zimmer *et al.* (2000) hat gezeigt, dass die prozessorientierte Modellierung der Isoprensynthese, gekoppelt mit einem Blattphotosynthesemodell, dem Guenther-Algorithmus überlegen ist. Diese Aussage muss allerdings unter dem Aspekt der betrachteten Spezies und Standorte gesehen werden. Da der Guenther-Algorithmus nur mit Licht und Temperatur arbeitet, kann er bei hoher Luftfeuchte entsprechender Baumart und Standort (z.B. in den Tropen) durchaus gute Ergebnisse liefern. An Standorten, bei denen die Wasserversorgung limitierend ist oder eine niedrigere Luftfeuchte eine Rolle spielt, wie zum Beispiel in Nord-, Süd- und Mitteleuropa überschätzt der Guenther-Algorithmus die gemessenen Isoprenemissionen.

Der Trend zu prozessorientierten Modellen führt nun dazu, dass man die Blattphotosynthese in detaillierter Weise mathematisch beschreiben will. Dabei müssen die metabolischen Wege der CO₂-Fixierung oder der Isoprensynthese beschrieben werden. Aber auch die physikalischen Vorgänge der CO₂-Diffusion in das Blatt hinein müssen berücksichtigt werden. Während es für die mathematische Beschreibung des Metabolismus schon einige Methoden gibt (Giersch, 2000; Morgan und Rhodes, 2001) und die Diffusionsvorgänge bei Evans und v. Caem-

merer (1996) ebenfalls beschrieben sind, treten jedoch bei der Kombination von Gaswechselprozessen mit den biochemischen Prozessen der CO_2 -Fixierung Probleme auf, wie in Noe (2000) dargelegt wird.

1.4 Zielsetzung

Ein Ziel dieser Arbeit ist es, zu untersuchen, welche „Form“ für ein mathematisches Modell der Blattphotosynthese benötigt wird, um die biochemischen und physikochemischen Prozesse der Blattphotosynthese zu beschreiben. Insbesondere soll ein Modell der Blattphotosynthese entwickelt werden, welches diese Aspekte beinhaltet.

Des weiteren soll das Blattphotosynthesemodell als Basis für ein Isoprenemissionsmodell dienen. Dazu ist es notwendig, dass die durch Umweltdaten wie Licht, Temperatur oder Luftfeuchte bedingten Regulationen der Blattphotosynthese untersucht werden. Da die Isoprensynthese energetisch von ATP und NADPH abhängt, sollen diese beiden Metabolite von dem zu entwickelnden Modell der Blattphotosynthese bereitgestellt werden. Das gleiche gilt für die Triosephosphate. Da diese im Calvin-Zyklus gebildet werden, muss das zu entwickelnde Modell zudem einige Schlüsselintermediate der Photosynthese beinhalten.

1.5 Technische Details

Diese theoretische Arbeit folgt einer Struktur, bei der die einzelnen Kapitel für sich abgeschlossen werden aber fortlaufend aufeinander aufbauen. Die „beschreibenden“ Kapitel 2, 3 und 4 legen die Grundsteine für die „experimentellen“ Kapitel 5, 6 und 7. Die Kapitel besitzen oft eine eigene kurze Einleitung. Im Falle der „experimentellen“ Kapitel wird die Diskussion auch im Kapitel selbst geführt. Kapitel 8 fasst die Arbeit zusammen und im Anhang (Kapitel 9) werden zusätzliche Informationen und Details aufgeführt.

Bezüglich der Darstellung von Zahlen habe ich mich der besseren Lesbarkeit wegen entschlossen, den Dezimalpunkt anstelle des Dezimalkommas zu verwenden. Dies hilft speziell beim Darstellen von Listen mit Zahlen oder bei Intervallangaben die Zahlen vom Trennzeichen zu unterscheiden.

Die Achsenbeschriftungen der Diagramme oder Bezeichnungen in Grafiken sind durchgängig in Englisch gehalten.

In dieser Arbeit wird oft das Wort „Modell“ verwendet. Im Kontext dieser Arbeit ist damit ein „mathematisches Modell“ gemeint.

Kapitel 2

Photosynthesemodelle – Eine Übersicht

Es gibt eine Vielzahl von Photosynthesemodellen. Diese sind je nach Forschungsinteressen und Forschungsgebieten verschieden ausgestaltet. Die Komplexität reicht von einfachen Beschreibungen der Bilanzgleichung der Photosynthese¹ bis hin zu komplizierten Enzymnetzwerken, die den Calvin-Zyklus mit fast allen bekannten Metaboliten beschreiben (Laisk und Eichelmann, 1989; Hahn, 1986).

Die Photosynthese beinhaltet jedoch nicht nur biochemische Prozesse. Die Absorption des Lichts und der Elektronentransport zur Energiegewinnung sowie der Gasaustausch zwischen Blatt und Umgebung sind weitere Teile dieses Prozesses.

Die Prozesse, welche die Photosynthese beschreiben, sind auf verschiedenen Organisationsebenen des pflanzlichen Organismus angesiedelt. Während der Prozess der CO₂-Fixierung in den Chloroplasten stattfindet und sich damit auf einem „subzellulären“ Organisationslevel befindet, ist die CO₂-Aufnahme über die Blattoberfläche auf der Organisationsstufe des gesamten Organes angesiedelt. Daher sind nicht alle Modellansätze gleichermassen geeignet die Blattphotosynthese zu beschreiben. Es wird hier ein Modell benötigt, das sowohl die CO₂-Aufnahme

¹CO₂ + 2 H₂O → [CH₂O] + H₂O + O₂

aus der Umgebung als auch die CO_2 -Fixierung beachtet. Ebenso muss die Interaktion der Umweltfaktoren mit den beschriebenen Prozessen berücksichtigt werden.

2.1 Bausteine der Photosynthesemodelle

Aufgrund der beteiligten Prozesse lassen sich drei wesentliche Bausteine eines Photosynthesemodells identifizieren.

1. **Lichtabhängige Reaktionen:** Im einfachsten Fall wird hier die Abhängigkeit der Photosyntheserate vom Licht in der Form $A = f(I)$ beschrieben. Je nach Anforderung kann jedoch eine detaillierte Beschreibung der Elektronentransportkette, des ATP/ADP Systems oder der Bereitstellung von Reduktionsäquivalenten in diesem Baustein erforderlich sein.
2. **CO_2 -Fixierung:** Die Vielfalt der Modelle ist bei der „Dunkelreaktion“² sehr groß. Wie schon zuvor beschrieben sind hier verschiedene Detailstufen des Calvin-Zyklus realisierbar. Deren Komplexität variiert natürlich mit der Anzahl der betrachteten Metaboliten.
3. **CO_2 -Aufnahme:** Im einfachsten Fall werden hier konstante Werte für die Blattleitfähigkeit angenommen, die keiner Regulation unterliegen. Möchte man eine realistische Beschreibung der Photosynthese erreichen, dann ist eine Regulation der CO_2 -Aufnahme durch die Stomata notwendig.

Neben diesen essentiellen Bausteinen lassen sich noch weitere identifizieren. So ist der Export von Photosyntheseprodukten, etwa über den Phosphattranslokator, ein weiterer Baustein eines Photosynthesemodells. Je nach betrachte-

²Tatsächlich kann die in vielen Lehrbüchern so genannte Dunkelreaktion nicht ohne Licht ablaufen. Zur Energetisierung des Calvin-Zyklus werden Faktoren wie etwa ATP benötigt. Diese stehen bei C_3 -Pflanzen über die Atmung jedoch nicht in ausreichendem Maße zur Verfügung.

tem Organismus spielen darüber hinaus noch Speichermetabolite wie Stärke oder Zucker eine Rolle.

Der Detailgrad, mit welchem die einzelnen Bausteine in einem Photosynthesemodell realisiert sein können, hängt sehr stark von der Fragestellung ab, für die das Modell entwickelt wurde.

2.2 Modellklassen

Aufgrund der möglichen Vielfalt bei der Realisierung von Blattphotosynthesemodellen, ist es sinnvoll, eine Klassifizierung vorzunehmen. Andererseits bedingt diese Vielfalt, dass es praktisch nicht möglich ist, die Modellrealisierungen in ein striktes Schema zu pressen. Daher sollen in diesem Abschnitt einige Begriffe und mögliche Ausprägungen von Blattphotosynthesemodellen genannt werden, die beim Studium der Literatur häufig anzutreffen sind.

2.2.1 Statische und dynamische Modelle

Modelle der Blattphotosynthese verfolgen in der Regel einen kombinierten Ansatz, bei dem der Gaswechsel und die Fixierung des aufgenommenen CO_2 als Prozesse beschrieben werden. Beispiele für solche Modellansätze findet man bei Katul *et al.* (2000) und Leuning (1995).

Generell kann man die Modelle der Blattphotosynthese in zwei Bereiche aufteilen. Ein Bereich umfasst die statischen (*steady-state*) Modelle. Zu diesem Bereich gehören die meisten publizierten Modelle der Blattphotosynthese. Die typische Ausprägung dieser Modelle sind algebraische Gleichungen, die die Beziehungen der Modellgrößen beschreiben. Sind nun die Parameterwerte und Eingangsdaten zu diskreten Zeitpunkten bekannt, so können die Modellgrößen durch einfaches Einsetzen dieser Werte berechnet werden.

Der andere Bereich beinhaltet dynamische Modelle. Beispiele für diese Modelle

finden sich bei Gross *et al.* (1991) und Kirschbaum *et al.* (1998). Streng genommen sind diese Modelle als „quasi-dynamisch“ zu bezeichnen, weil durch Gleichungen der Form

$$\frac{dX}{dt} = \frac{X_{eq} - X}{\tau_X} \quad (2.1)$$

die Dynamik durch die Abstände der Größe X von ihrem *steady-state* Wert X_{eq} abhängt und nicht von der Größe selbst. Mit diesem Verfahren kann man prinzipiell jedes *steady-state* Modell in ein dynamisches Modell überführen. Die dabei auftauchenden Probleme werden in Noe (2000) diskutiert.

2.2.2 Klassifikation

Neben der Einteilung in die im letzten Abschnitt beschriebenen Bereiche kann man die Modelle der Blattphotosynthese auch in Klassen einteilen. Auch hierzu findet man in Noe (2000) detaillierte Ausführungen. Da in der Literatur häufig bestimmte Termini dieser Klasseneinteilung verwendet werden, sollen die häufigsten Klassen hier vorgestellt werden.

empirisches Modell: Das empirische Modell verwendet, salopp ausgedrückt, „irgendwelche“ mathematischen Funktionen, die die vorgegebenen Messdaten möglichst gut wiedergeben. Ein Zusammenhang mit den zugrunde liegenden Mechanismen besteht nicht.

mechanistisches Modell: Diese Klasse stellt den Idealfall dar. Alle Modellgleichungen können aus bekannten Mechanismen abgeleitet werden und es ist möglich, das Modell aus bekannten Daten zu parametrisieren.

semi-empirisches / semi-mechanistisches Modell: Bei dieser Klasse handelt es sich um einen Mischtyp zwischen den beiden „Extremen“. Die meisten Blattphotosynthesemodelle fallen unter diese Klasse.

Betrachtet man diese Klasseneinteilung, so ist es klar, weshalb die Klasse der Mischformen die meisten Modellrealisierungen enthält. Rein empirische Modelle

unterliegen diversen Einschränkungen und besitzen insbesondere geringe Vorhersagekraft. Üblicherweise verwendet man pro Szenario einen schon vorhandenen Datensatz, auf den nun die Parameter des empirischen Modells angepasst werden. Variieren die Datensätze, weshalb auch immer, so erhält man pro Szenario einen neuen Parametersatz³. Da diese Parametersätze jedoch keinen Bezug zum Mechanismus besitzen, kann man mit dem empirischen Modell keine Voraussagen treffen, wie der Mechanismus auf verschiedene Szenarien reagiert. Im günstigsten Fall kann man durch statistische Untersuchungen solche Szenarien identifizieren, in denen das Modell ähnliche Parameter verwendet.

Rein mechanistische Modelle lassen sich in der Biologie, wenn überhaupt, nur in wenigen Fällen erstellen. Da einerseits die Mechanismen bekannt sein müssen und andererseits auch Daten zur Parametrisierung der beschreibenden Gleichungen zur Verfügung stehen müssen, ist es in der Regel notwendig, dass man alle Bedingungen, die auf das System einwirken, kontrollieren kann. Bei lebenden Organismen ist dies in der Regel nicht möglich. Daher ist die Strategie der Mischformen klar. Verwende „soviel Mechanismus wie möglich“ und ergänze weitere benötigte Zusammenhänge durch empirische Beschreibungen.

Es führen jedoch noch andere Einflüsse auf solche Mischformen. So ist es unter Umständen unsinnig, einen bekannten Mechanismus in allen Einzelheiten zu beschreiben, wenn dadurch keine signifikante Verbesserung in der Modellantwort erreicht wird. In diesem Fall läuft man Gefahr, dass durch die Details eine Menge *overhead* anfällt. Dieser kann sich in langen, unhandlichen Parameterlisten niederschlagen, die die Arbeit mit einem solchen Modell unnötig verkomplizieren. Daneben kann im Fall einer Implementierung des Modells als computergestütztes Simulationsprogramm das Laufzeitverhalten negativ beeinflusst werden.

Häufig hängt die Entscheidung, ob eine detaillierte mechanistische Beschreibung notwendig ist von der Fragestellung ab, für welche das Modell entwickelt

³Daher spricht man in der Mathematik bei dieser Klasse auch nicht von „Modell“ sondern von einer „Parametrisierung“.

wurde. Als Beispiele für dieses Problem kann man die Photosynthesemodelle von Pearcy *et al.* (1997) und Kirschbaum *et al.* (1998) betrachten. Diese beantworten die Frage nach dem Verhalten der Nettophotosyntheserate im Fall von Lichtflecken exzellent. Dabei werden Änderungen des Photonenflusses im Sekundenbereich bis maximal Minutenbereich simuliert. Die detaillierte Beschreibung vieler lichtabhängiger Prozesse erlaubt es, solche kurzen Ereignisse dynamisch richtig zu beschreiben. Versucht man dagegen mit diesen Modellen ganze Tagesgänge oder noch längere Zeiträume zu beschreiben, führt dies zu sehr langen Simulationsläufen. Bei solchen „langen“ Simulationen liegt eine sinnvolle zeitliche Auflösung meist im Bereich mehrerer Minuten, während die auf Lichtflecken optimierten Modelle intern weiterhin mit einer sehr kleinen Schrittweite im Bereich von Millisekunden gerechnet werden. Dies führt in den genannten Fällen dann zur Akkumulation numerischer Fehler. Solche Fehlerakkumulationen können, im Falle „langer“ Simulationsläufe, zu einer totalen Fehlinterpretation der Prozesse durch das Modell oder wegen numerischer Fehler zum Simulationsabbruch führen.

Kapitel 3

Die Beschreibung der Blattphotosynthese

In diesem Kapitel sollen die grundlegenden theoretischen Beschreibungselemente der Blattphotosynthese vorgestellt werden. Diese bilden die Grundlage für viele derzeit verwendete Modelle der Blattphotosynthese. Es werden einige dieser Modelle vorgestellt und das zentrale Problem der Kopplung von Modellen der Blattleitfähigkeit an Modelle der biochemischen CO₂-Fixierung thematisiert.

3.1 Gaswechsel

Als Schnittstelle zwischen dem Blattinneren und der Umgebung spielen die Stomata eine herausragende Rolle. Der gesamte Gasaustausch zwischen der Pflanze und der sie umgebenden Atmosphäre findet über die Stomata statt. Neben der Energetisierung durch Licht ist die Aufnahme von CO₂ aus der Luft ein zweiter essentieller Prozess¹ für das Wachstum der Pflanze. Da die Stomata ebenfalls regulierend auf den Wasserhaushalt der Pflanze einwirken, kontrollieren diese al-

¹Es gibt natürlich noch viele weitere essentielle Prozesse wie die Wasser- und Nährstoffaufnahme über die Wurzeln, der Ionentransport, Transport und Einlagerung von Speicherstoffen, die Zellteilung und viele mehr.

lerdings viele lebensnotwendige Prozesse der Pflanze.

In diesem Kontext wird deutlich, dass eine adäquate Beschreibung der Regulation der Stomata für ein prozessorientiertes Photosynthesemodell eine ebenso herausragende Rolle spielt.

3.1.1 Die Blattleitfähigkeit

Eine physiologische Kenngröße, die den Gasaustausch über die Stomata beschreibt, ist die Blattleitfähigkeit g_s . Sie wird aus dem Fick'schen Gesetz abgeleitet. Dieses beschreibt allgemein einen Teilchenstrom \vec{j} über eine Grenzfläche. Verwendet man statt der Teilchendichte ρ_N die molare Dichte ρ_m so ergibt sich das Fick'sche Gesetz zu:

$$\vec{j} = -D \text{grad } \rho_m, \quad (3.1)$$

mit einer Diffusionskonstanten D . Aus dem Fick'schen Gesetz und der Kontinuitätsgleichung² erhält man nun die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} = -D \Delta \rho_m. \quad (3.2)$$

Drückt man nun ρ_m durch eine Konzentration c aus, so ergibt sich Gleichung 3.2 zu

$$\frac{dc}{dt} = -DF \frac{\Delta c}{\Delta x}. \quad (3.3)$$

Diese beschreibt die Änderung der Konzentration (Δc) entlang einer Strecke $\Delta x = l$ senkrecht zur Durchtrittsfläche F . Fasst man nun die Diffusionskonstante D , die Fläche F und die Strecke l als einen Ausdruck auf, so ergibt sich mit

$$-D \frac{F}{l} = \frac{1}{R} := g_s \quad (3.4)$$

²Die Kontinuitätsgleichung ist eine Erhaltungsgleichung der Flussdichte. Letzlich sagt diese aus, dass eine Dichte- oder Konzentrationsänderung nur durch Zu- oder Abfluss von Teilchen möglich ist. Näheres zum Fick'schen Gesetz und zur Kontinuitätsgleichung findet man in Atkins (1995) und Stöcker (1994).

eine Leitfähigkeit. Analog zum elektrischen Stromkreis beschreibt also g_s einen reziproken Widerstand. Die Gleichungen 3.3 und 3.4 beschreiben nun den Gasaustausch über die Stomata. Ersetzt man die allgemeinen physikalischen Größen in Gleichung 3.3 durch die in der Pflanzenphysiologie gebräuchlichen, so ergibt sich für die Nettoassimilationsrate die Gleichung

$$A = g_s(c_a - c_i) \quad (3.5)$$

und daraus durch Umformen

$$g_s = \frac{A}{c_a - c_i}. \quad (3.6)$$

In dieser Form ist die Blattleitfähigkeit g_s die Kenngröße, die angibt, in welchem Verhältnis die CO_2 -Nettoassimilation zum Konzentrationsgradienten ΔCO_2 steht. Gleichung 3.6 kann analog für die Nettotranspiration erstellt werden und erhält dann die Form

$$g_w = \frac{E}{w_a - w_i}. \quad (3.7)$$

Dabei ist E die Nettotranspiration aus dem Blatt, w_a und w_i stellen die Wasserdampfpartialdrücke im Blatt und der Umgebung dar. Die Blattleitfähigkeiten für CO_2 und H_2O (Wasserdampf) können ineinander überführt werden, so dass es normalerweise genügt, eine der beiden Gleichungen 3.6 oder 3.7 zu betrachten. Man erhält

$$g_s = \frac{g_w}{1.605}. \quad (3.8)$$

Der Faktor 1,605 errechnet sich aus den unterschiedlichen Diffusivitäten von CO_2 und H_2O .

3.1.2 Die Regulation der Blattleitfähigkeit

Die im letzten Abschnitt hergeleitete Gleichung der Blattleitfähigkeit g_s (Gleichung 3.6) beinhaltet keinerlei Information darüber, welche regulatorischen Vorgänge zu dieser Leitfähigkeit geführt haben. Da die Blattleitfähigkeit sowohl über

die CO₂-Aufnahme als auch über den Wasserverlust durch die Transpiration entscheidet, ist klar, dass die Pflanze diesen lebensnotwendigen Parameter in hohem Maße regulieren muss. Nach Lösch (2001) können Faktoren wie das Licht, die Temperatur, die Luftfeuchte, der CO₂-Gehalt im Blattinneren, das Wasserpotential und diverse Phytohormone, etwa ABA, die Blattleitfähigkeit beeinflussen.

Nimmt man an, dass diese Faktoren alle zusammen auf die Blattleitfähigkeit einwirken, so kann man diese allgemein folgendermaßen darstellen

$$g_s = F(I, T, e^*, c_i, \dots). \quad (3.9)$$

In dieser Form sagt diese Gleichung noch nichts darüber aus, in welcher Art und Weise die Faktoren auf die Blattleitfähigkeit einwirken oder ob Kombinationen verschiedener Faktoren wirksam sind. Diese Frage soll später in dieser Arbeit im fünften Kapitel noch genauer betrachtet werden.

Ein interessanter Punkt ist jedoch in dieser Form schon sichtbar, die Blattleitfähigkeit hängt neben externen Faktoren (Licht, Temperatur und Luftfeuchte) auch von Faktoren ab, die unter anderem von der Blattleitfähigkeit kontrolliert werden. Am wichtigsten ist in diesem Zusammenhang die intrazelluläre CO₂-Konzentration zu nennen. Farquhar *et al.* (1978) und Wong *et al.* (1979) leiten aus der Homöostase der intrazellulären CO₂-Konzentration³ eine Regulation der Stomata durch die Photosynthesekapazität des Mesophylls ab. Allerdings ist nach Mohr und Schopfer (1992) keine Information darüber vorhanden, wo der Sensor liegt und wie der Mechanismus dieses Sensor funktioniert. Auch Jarvis und Davies (1998) stellen fest, dass die Stomata auch in Epidermisstreifen ohne Mesophyllkontakt bei erhöhtem ambientem CO₂-Gehalt der Luft schliessen. Es ist somit bislang noch nicht geklärt, in welcher Weise ein *feedback* der intrazellulären CO₂-Konzentration oder der Photosynthese auf die Blattleitfähigkeit einwirkt.

³Die aus Messungen errechneten Werte für c_i stagnieren auch bei einer Erhöhung des Lichtflusses im Bereich von 200 $\mu\text{mol mol}^{-1}$.

3.2 Allgemeines Modell der Blattphotosynthese

Aufgrund der Informationen über den Gaswechsel der Pflanzen aus dem vorherigen Abschnitt und der Herleitung von Gleichung 3.5 kann man ein allgemeines Modell der Blattphotosynthese formulieren, das aus zwei Gleichungen besteht.

$$g_s = F(I, T, e^*, c_i, \dots) \quad (3.10.a)$$

$$A = g_s(c_a - c_i) \quad (3.10.b)$$

Im *steady-state* Fall besteht nun die Aufgabe darin, die Gleichungen für die momentanen Werte der Faktoren Licht (I), Temperatur (T) etc. zu lösen. Allerdings birgt diese allgemeine Formulierung ein Problem. Solange c_i nicht bekannt ist, kann selbst unter der Annahme, dass g_s von c_i unabhängig ist, Gleichung 3.10.b nicht ohne weiteres gelöst werden.

Ein solches Gleichungssystem wird in der Mathematik als „nicht-geschlossen“ bezeichnet. Man benötigt also noch weitere Informationen, damit man das System lösen kann. Um an diese Information zu gelangen, wurden in der Vergangenheit einige Lösungsansätze diskutiert. Katul (2000) gibt eine detaillierte Übersicht über die möglichen *closure-terms*, die zur Lösung herangezogen wurden.

Allgemein lassen sich zwei mögliche Wege beschreiben, die das Dilemma von Gleichung 3.10.b lösen können. Entweder man schätzt c_i aus weiteren Informationen wie etwa dem Wasserdampfdruckdefizit (VPD) zwischen Blattoberfläche und der Umgebung ab oder man berechnet eine alternative Nettoassimilationsrate $A^* = f(I, T, c_i, \dots)$. Im zweiten Fall kann man durch Umstellen von Gleichung 3.5 nach

$$c_i = c_a - \frac{A^*}{g_s} \quad (3.11)$$

c_i berechnen. Farquhar *et al.* (1980) und v. Caemmerer und Farquhar (1981) beschreiben ein Modell der C_3 -Photosynthese, das die alternative Nettoassimilationsrate A^* liefern kann. Ein Beispiel für die Anwendung dieses Ansatzes findet man bei Dang *et al.* (1998).

3.3 Biochemisches Assimilationsmodell

Betrachtet man die Photosynthese aus einem biochemischen Blickwinkel, so kann man ebenfalls eine Nettoassimilation A berechnen. Diese basiert auf den bekannten biochemischen Charakteristika der Rubisco und der NADPH- und ATP-Abhängigkeit der CO_2 -Assimilation.

Assimilationsmodell nach Farquhar

Ich möchte an dieser Stelle das Modell von Farquhar *et al.* (1980) vorstellen. Dieses Modell wird häufig angewendet (v. Caemmerer und Farquhar, 1981; Gross *et al.*, 1991; Pearcy *et al.*, 1997; Kirschbaum *et al.*, 1998; Zimmer *et al.*, 2000) und auch ich verwende noch später in dieser Arbeit eine Modifikation nach Giersch *et al.* (1990) dieses Modells.

Die Nettoassimilation A ist in diesem Kontext das Ergebnis der Carboxylierungsrate V_c , von der die Photorespiration, gebildet durch die Oxygenierungsrate V_o und andere respiratorische Prozesse (R_d) abgezogen werden.

$$A = V_c - \frac{1}{2}V_o - R_d \quad (3.12)$$

Da die Carboxylierungsreaktion mit der Oxygenierungsreaktion in Konkurrenz steht, muss dieses bei der Michaelis-Menten Konstante der Carboxylierungsrate beachtet werden. Ein K_m -Wert, welcher die kompetitive Hemmung durch O_2 berücksichtigt ergibt sich dann zu

$$K_m = K_c \left(1 + \frac{O}{K_o} \right) \quad (3.13)$$

wobei K_c und K_o die entsprechenden Michaelis Konstanten für die Carboxylierung und Oxygenierung darstellen, O ist der Sauerstoffpartialdruck.

Die Carboxylierungsrate unter CO_2 limitierten Bedingungen errechnet sich nun zu

$$V_c = \frac{V_{cmax} \cdot c_i}{c_i + K_m}, \quad (3.14)$$

und analog

$$V_o = \frac{V_{omax} o_i}{o_i + K_m} \quad (3.15)$$

erhält man die Oxygenierungsrate. Das Verhältnis von Oxygenierung zu Carboxylierung hängt von der Affinität ($S_{c/o}$) der Rubisco zum CO_2 ab. Diese Affinität wiederum bestimmt den CO_2 -Kompensationspunkt $\Gamma^* = 0,5O/(S_{c/o}s_c/s_o)$, wobei s_c und s_o die Löslichkeit von CO_2 respektive Sauerstoff in Wasser angeben. Γ^* wird experimentell ermittelt und es gilt

$$\frac{V_o}{V_c} = \frac{2\Gamma^*}{c_i}. \quad (3.16)$$

Aus den Gleichungen 3.14, 3.15 und 3.16 lässt sich nun die CO_2 limitierte und RuBP gesättigte Nettophotosyntheserate darstellen.

$$A(c) = \frac{V_{cmax}(c_i - \Gamma^*)}{c_i + K_m} - R_d. \quad (3.17)$$

Unter RuBP-limitierten Verhältnissen ist die Elektronentransportrate J konstant. Eine Erhöhung des CO_2 Partialdrucks führt dann zu einer Erhöhung der Carboxylierungsrate auf Kosten der Oxygenierung. Die minimale Elektronentransportrate ergibt sich nun zu

$$J = 4(V_c + V_o). \quad (3.18)$$

Mit den Gleichungen 3.14, 3.16 und 3.18 errechnet man nun die RuBP limitierte Nettoassimilationsrate zu

$$A(J) = \frac{J(c_i - \Gamma^*)}{4(c_i + 2\Gamma^*)} - R_d. \quad (3.19)$$

Die Nettoassimilation lässt sich mit den Gleichungen 3.17 und 3.19 folgendermaßen darstellen

$$A = \min\{A(c), A(J)\} := f(I, T, c_i) \quad (3.20)$$

wobei gilt, dass $J = f(I, T)$ von der eingestrahnten Lichtmenge I und der Temperatur abhängt. Die Temperaturabhängigkeit wird zudem von den „Konstanten“

des Modells eingebracht, so gilt $K_c, K_o, \Gamma^*, V_{cmax}, V_{omax} = f(T)$ und damit sind diese von der Temperatur abhängig. Die Definitionen dieser temperaturabhängigen Terme findet man in Lambers *et al.* (1998). Da auch in diesem Ansatz c_i bekannt sein muss, ist diese Beschreibung der Blattphotosynthese ebenfalls nicht ohne eine Nebenbedingung, die eine Aussage über c_i macht, lösbar.

3.4 Eine mögliche Lösung des c_i -Dilemmas

In den Arbeiten von Gross *et al.* (1991), Pearcy *et al.* (1997) und Kirschbaum *et al.* (1998) wird eine Lösung des c_i -Dilemmas vorgestellt, die mathematisch gesehen die naheliegendste Lösung darstellt. Kombiniert man das allgemeine Modell der Blattphotosynthese (Gleichungen 3.10.a und 3.10.b) mit dem biochemischen Modell (Gleichung 3.20), so hat man die Möglichkeit, dasjenige c_i zu finden, das beide Gleichungen erfüllt. Man sucht also c_i so, dass die folgende Bedingung erfüllt wird:

$$A_{allg.}(c_i) - A_{BioChem}(c_i) = 0. \quad (3.21)$$

Ganz trivial ist die Lösung dieser Gleichung jedoch nicht. Speziell im biochemischen Teil $A_{BioChem}(c_i)$ ist c_i quadratisch vertreten. Das bedeutet, dass es eine mehrdeutige Lösungsmenge gibt.

Verwendet man zudem ein numerisches Lösungsverfahren, etwa die Newton-iteration zur Lösung des Nullstellenproblems (Gl. 3.21), so führt mit Sicherheit nicht jedes c_i zu einer Konvergenz des Verfahrens. Daher muss auch in diesem Fall mit diversen Nebenbedingungen für c_i gearbeitet werden. Die Einschränkung auf einen physiologisch sinnvollen Bereich für die zu untersuchende Spezies ist dabei der erste Schritt. Außerdem ist die Wahl eines sinnvollen Startwertes für eine Simulation ein weiterer wichtiger Schritt, mit dem sichergestellt wird, dass Gleichung 3.21 lösbar bleibt.

Man kann etwa für einen festen Satz an Umweltparametern die Gleichung so-

lange iterieren, bis die Änderung von einem Iterationsschritt zum nächsten unter einem gewählten Genauigkeitskriterium liegt. Dann nimmt man die gefundenen Werte der Variablen als Startwerte der Simulation. Diese Werte müssen jedoch nicht mit eventuell messbaren Werten unter den gewählten Umweltbedingungen korreliert sein. Hier liegt auch die Hauptschwäche dieses Ansatzes, es werden einfach passende Werte erzeugt.

Im weiteren Verlauf einer Simulation muss nun Gleichung 3.21 immer wieder gelöst werden. Daher wird immer wieder der Wert von c_i an den jeweiligen Systemstatus angepasst. Dieses Verfahren birgt speziell bei langen Laufzeiten der Simulation das Problem, dass eventuelle Fehler sehr stark akkumulieren und das System keine sinnvollen Resultate mehr liefert. Daneben ist mit einem solchen Verfahren generell keine Möglichkeit gegeben, eine echte Prognose zu liefern, da der Systemstatus und speziell c_i immer an den vorherigen Systemstatus angepasst wurden. Die von diesem Ansatz gezeigte Dynamik ist somit ein aufgeprägtes Systemverhalten und kein unabhängiges.

3.5 Diskussion

Die meisten der heute bekannten Blattphotosynthesemodelle verwenden entweder den allgemeinen Modellansatz wie in den Gleichung 3.10.a und 3.10.b oder den biochemischen Ansatz mit Gleichung 3.20 oder eine Kombination dieser Gleichungen. Durch die Kombination entsteht auch das c_i -Dilemma, wenn man zur Regulation der Netto-Blattphotosynthese auch die Blattleitfähigkeit einbezieht.

Das Hauptproblem dieser Lösungen ist, dass diese im mathematischen Kontext nur für *steady-state* Bedingungen gültig sind. Die damit verbundenen Probleme wurden schon in Noe (2000) diskutiert. Des weiteren ergeben sich Probleme, wenn man diese Modelle mit dynamischen Eingangsdaten über längere Zeiträume berechnen will. Zum Beispiel ist Gleichung 3.11 für $c_i = 0$ undefiniert. Das bedeutet, man muss sicherstellen, dass selbst in der Nacht die Blattleitfähigkeit

niemals Null wird. Daneben tritt durch die Anpassung des c_i -Wertes an die jeweiligen Assimilationsraten das Problem auf, dass bei längerer Laufzeit und etwa der Überschätzung der Assimilationsrate automatisch auch ein „falscher“ c_i -Wert ermittelt wird, der sich zudem noch akkumuliert, da c_i wieder in den nächsten Rechenschritt einfließt.

Ein Problem für die Vorhersagekraft der vorgestellten Modelle stellt die Struktur dar, mit der man das c_i -Dilemma gelöst hat. Durch das permanente Anpassen von c_i an den jeweiligen Status der Blattleitfähigkeit und der Nettoassimilation wird c_i ein letztlich artifizielles Verhalten aufgeprägt. In der Realität wird eine Pflanze nicht die gerade passende c_i -Konzentration einstellen sondern das verwenden, was vorhanden ist. Der c_i -Pool wird über eine Quelle gespeist und über einen Verbraucher abgebaut. Dabei sind diese beiden Prozesse jeweils getrennt reguliert, sowohl räumlich als auch zeitlich.

Kapitel 4

Beschreibung des prozessorientierten Photosynthesemodells

4.1 Einleitung

Die Informationen aus dem Überblick in Kapitel 2 und der Betrachtung einiger Modelle der Blattphotosynthese in Kapitel 3 werden verwendet, um eine Modellbeschreibung für ein prozessorientiertes Modell der Blattphotosynthese zu entwickeln.

Ich möchte zunächst auf die Begriffe „Prozess“ und „Prozessorientierung“ eingehen und einige Probleme beschreiben, die mit der Verwendung dieser Begriffe auftauchen. Daneben werden noch die Prozesse der Blattphotosynthese kurz vorgestellt, die Eingang in das hier entwickelte Modell finden.

Anschließend stelle ich in einer kurzen Exkursion die Systemanalyse als Werkzeug und Hilfsmittel bei der Formulierung eines Modells vor. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels soll dann das Modell der Blattphotosynthese verbal beschrieben und im Übersichtsdiagramm dargestellt werden.

4.2 Prozesse und Prozessorientierung

Das Wort «Prozess» wird vom lateinischen *processus* abgeleitet und bedeutet Fortgang oder Verlauf. Es impliziert also immer einen Vorgang, bei dem mehrere Schritte notwendig sind, um etwa von einem Ausgangszustand ausgehend zu einem Endzustand zu gelangen. Dabei ist nicht gesagt, dass dieser Vorgang zwingend aus verschiedenen Teilen oder Schritten bestehen muss. Es kann auch nur ein Schritt notwendig sein, der aber immer wieder angewendet werden muss um den Endzustand zu erreichen. Der Terminus «Prozessorientierung» bietet daher viele Interpretationsmöglichkeiten.

Die Aussage, dass prozessorientierte Modelle die zugrundeliegenden Prozesse beschreiben ist natürlich einleuchtend und klingt zunächst trivial. Allerdings ist damit nicht klar, welche oder wieviele Prozesse mit dem Modell beschrieben werden. Je nach Komplexität des betrachteten Systems ist sogar die Festlegung der Prozesse schwierig. Daher ist es sehr wahrscheinlich, dass verschiedene Personen verschiedene Ansichten darüber entwickeln, wie die Prozesse eines beobachtbaren Systems zu beschreiben sind.

Häufig wird auch der Fehler begangen, dass der Begriff des prozessorientierten Modells mit dem des mechanistischen Modells gleichgesetzt wird. Dies ist insofern falsch, als ein prozessorientiertes Modell keine neue Modellklasse im Sinne der Klassifikation aus Kapitel 2 definiert. Man kann Prozesse sowohl empirisch als auch mechanistisch beschreiben. Um eine Diskussionsbasis herzustellen ist es somit notwendig, dass man eine detaillierte Beschreibung der Prozesse oder besser noch Definitionen erarbeitet, die dann für die Modellierung als Basis dienen.

4.2.1 Prozesse der Blattphotosynthese

Bei der Blattphotosynthese lassen sich, wie schon in Kapitel 2.1 angedeutet wurde, mehrere Prozesse festlegen. Der zentrale Prozess, der beschrieben werden soll, ist natürlich die CO₂-Aufnahme. Dieser Prozess ist nicht notwendigerweise mit

der CO_2 -Nettoassimilationsrate A identisch. Wie im vorherigen Kapitel beschrieben kann diese Nettoassimilationsrate sowohl aus der Blattleitfähigkeit als auch der Kohlenstofffixierung im Calvin-Zyklus bestimmt werden. Es liegt daher nahe diese als zwei Prozesse zu betrachten. Der eine beschreibt die Aufnahme des CO_2 in das Blatt und der andere die Verwendung desselben. Aus dieser Aufteilung, ergibt sich, dass man sowohl die CO_2 -Aufnahme als auch die Verwendung getrennt betrachten kann.

Die Regulationsfaktoren der CO_2 -Aufnahme sind letztlich die Blattleitfähigkeit und der Kohlenstoffgradient, der zwischen der Umgebung und dem Verbrauchsort liegt. Da die Blattleitfähigkeit selbst wieder durch das Wechselspiel zwischen Blatt und Umgebung eingestellt wird, ist dieser Vorgang ebenfalls ein Prozess, der bei der Modellierung zu beachten ist. Die Hauptregelgrößen stellen in diesem Fall die Umweltfaktoren Licht, Temperatur und Luftfeuchte dar.

Der Verbrauch des aufgenommenen CO_2 ist ebenfalls ein Prozess, der maßgeblich vom Licht gesteuert wird. Hinter diesem Prozess verbirgt sich der Calvin-Zyklus und noch Transportprozesse wie der Austausch von Triosephosphaten zwischen dem Chloroplasten und dem Cytosol. Es ist auch hier möglich, zwei Teilprozesse zu betrachten. Dabei ist ein Prozess die von Licht abhängige Bereitstellung von Energie in Form von ATP und von Reduktionsäquivalenten. Der andere Prozess ist dann die Fixierung des Kohlenstoffs und seine weitere Verwendung.

Wie man schon an den genannten Beispielen sieht, kann man immer mehr Details der Prozesse dadurch beschreiben, dass man immer mehr Teilprozesse betrachtet. Eine solche Granulierung macht in den wenigsten Fällen einen Sinn. Man muss also bei der Definition der Prozesse darauf achten, dass man die „wichtigen“ Prozesse herausfiltert und betrachtet. Ansonsten wird die Komplexität des Modells unnötig erhöht, was letztlich dazu führt, dass man ohne Qualitätsgewinn in der Modellantwort dieses immer schwerer überblickt oder es für den gewünschten Zweck gar komplett unbrauchbar wird.

4.2.2 Exkursion: Systemanalyse

Bevor ich zur Beschreibung des prozessorientierten Blattphotosynthesemodells komme, möchte ich an dieser Stelle eine kurze Übersicht über die Methoden der Systemanalyse geben. Eine sehr gelungene und verständliche Einführung in die Systemtheorie und Systemanalytik findet man bei Bossel (1992). Eine weitere gute grundlegende Einführung findet man bei Grams (1992).

Beobachtungen unserer Realität zeigen, dass weniger die Einzeleigenschaften der Bestandteile als vielmehr deren Zusammenspiel diese Realität prägen. Der Begriff „System“ wird daher für Ensembles interagierender Bestandteile verwendet. Die Systemanalytik ist das Werkzeug, mit dem man solche Systeme untersucht und die Systemtheorie bildet die theoretische Grundlage dafür.

Nach Bossel (1992) kann man folgende Definitionen für ein System formulieren:

- Ein System besteht aus einem oder mehreren strukturell verbundenen Elementen, deren Zustände von anderen Elementen (oder sich selbst) abhängen und die Zustände anderer Elemente (oder sich selbst) beeinflussen. Sowohl die Struktur als auch die Elemente sind dabei notwendige Bestandteile eines Systems.
- Ein System hat einen Zweck oder kann einen zugeschrieben bekommen.
- Ein System hat eine Systemgrenze die es von seiner Systemumwelt trennt.

Diese Definitionen geben ein abstraktes Grundkonzept wieder, das für alle Systeme gilt. Bei technischen Systemen ist es in der Regel einfacher, den Systemzweck anzugeben als bei lebenden Systemen. Ein Fahrzeug dient zum Beispiel dem Transport, aber wozu genau dient etwa ein Blatt? Es fallen einem hier sofort viele „Zwecke“ ein, die einem Blatt zugeordnet sind, etwa die Photosynthese, die Energieversorgung der Pflanze oder die Regulation des Transpirationsstroms um nur einige zu nennen.

Die Formulierung eines Systemzwecks ist letztlich ein subjektiver Vorgang, bei dem man auf die Erfahrungen, Ergebnisse und Informationen die über das System bekannt sind, zurückgreift. Interessanterweise entscheidet die subjektive Auswahl eines Systemzwecks darüber, welche Zustände für ein System wahrscheinlich sind. Da diese Zustände aus der Struktur der Elemente im System entstehen, bestimmt der Zweck auch über die Elemente und die Struktur, die man beachten muss.

Systeme, Prozesse und Modelle

Innerhalb von Systemen finden laut Definition also Zustandsänderungen der Elemente statt. Diese Zustandsänderungen sind die Prozesse, die im System ablaufen. Daher besitzen Systeme einen oder mehrere Prozesse. Wobei natürliche Systeme, wie eine Pflanze etwa, in der Regel sehr viele Prozesse beinhalten.

Die Systemanalyse hat nun das Ziel, ein System über seine Prozesse zu beschreiben. Die verwendete „Sprache“ ist dabei das Modell, wobei das Modell dem Verhalten des reellen Systems möglichst nahekommen soll. Daher besteht die Aufgabe letztlich darin, die Elemente und Prozesse des Systems zu identifizieren, die für die Abbildung des reellen Verhaltens notwendig sind. In der Regel führt diese Untersuchung dann zu einem besseren Verständnis des Systems.

Der „Prozess“ der Systemanalyse oder auch Modellierung ist ein iteratives Verfahren. Ausgehend von Beobachtungen des reellen System und dem definierten Modellzweck erstellt man eine Modellbeschreibung (wörtlich und formal) die dann in ein Simulationsmodell münden. Dieses wird nun mit Parametern, zugehörigen Umweltfaktoren und Anfangsbedingungen gelöst und man erhält einen Satz von Modellergebnissen. Dieser wird nun mit dem reellen System verglichen. In der Regel müssen Details des Modells und seiner Formulierung angepasst werden um ein besseres Modellergebnis zu erzielen. Dies wiederholt sich sooft, bis ein gültiges Abbild des realen Systems erreicht wird. Allerdings unterliegt dieses Abbild den durch den Modellzweck gezogenen Grenzen.

4.3 Systemanalyse der Blattphotosynthese

In diesem Abschnitt möchte ich die allgemeine Systemanalyse und Beschreibung des Blattphotosynthesemodells liefern. Das System „Blattphotosynthese“ lässt sich durch mehrere Subsysteme (Blattleitfähigkeit, biochem. CO₂-Fixierung, Regulation durch Umweltparameter,...) beschreiben, die alle wieder eine eigene Systemanalyse benötigen.

4.3.1 Problembeschreibung

Im Zusammenhang mit der biogenen Emission von flüchtigen organischen Stoffen (BVOC¹, vgl. Einleitung) ist die CO₂-Aufnahme der BVOC emitierenden Pflanzen von Interesse. Intermediate des Calvin-Zyklus, wie DHAP und GAP, aber auch ATP und NADPH dienen als Vorläuferstoffe und Faktoren bei der Synthese von Isopren und Monoterpenen.

Zur Vorhersage dieser Vorläuferstoffe und Faktoren soll ein Modell entwickelt werden, welches die Blattphotosynthese simuliert. Das Modell soll in der Lage sein, auf Umweltfaktoren wie Licht, Temperatur und Luftfeuchte zu reagieren. Es ist angestrebt, ein Modell mit einem geringen Komplexitätsgrad und einer möglichst erweiterbaren Struktur zu entwickeln.

4.3.2 Modellzweck

Der Modellzweck ist eine möglichst adäquate Beschreibung der Blattphotosynthese, die insbesondere in der Lage ist, mit vorgegebenen Klimadaten eine Vorhersage über die Blattphotosyntheserate und einzelner ausgewählter Intermediate des Calvin-Zyklus zu liefern. Die Klimadaten können dabei entweder aus Messungen stammen oder mit meteorologischen Prognosemodellen simuliert werden.

¹*biogenic volatile organic compounds*

4.3.3 Systemgrenze

Die Systemgrenze wird durch das physikalische Blatt festgelegt. Das bedeutet, dass alles, was sich ausserhalb befindet, zur Umgebung gehört. So sind die Klimafaktoren und auch der CO_2 -Gehalt der Luft als externe Größen aufzufassen. Es gibt zudem einen Austausch von Stoffen zwischen dem Blatt und den anderen Teilen der Pflanze. Speziell die alternativen Kohlenstoffquellen, wie Zucker und Stärke, sind hier von Bedeutung. Diese alternativen C-Quellen werden im Modell ebenfalls als externe Größen gewertet.

4.3.4 Beschreibung

Das Modell beschreibt die Blattphotosynthese unter dem Einfluss der Umweltfaktoren Licht, Temperatur und Luftfeuchte als steuernde Kräfte. Das System Blattphotosynthese wird dabei in drei Subsysteme geteilt.

1. Blattleitfähigkeit g_s .
2. CO_2 -Aufnahme und dynamischer intrazellulärer CO_2 Speicherpool c_i .
3. CO_2 -Fixierung und Austausch von Triosephosphaten.

Ein Ziel dieser Aufteilung ist es, die Subsysteme austauschbar zu gestalten, so dass jedes durch ein eventuell detaillierteres System ersetzt werden kann ohne dass die restlichen davon betroffen werden.

Subsystem 1: Blattleitfähigkeit

Die Blattleitfähigkeit g_s wird durch die Umweltfaktoren Licht, Temperatur und Luftfeuchte gesteuert. Mit einer empirischen Steuer- oder Zielfunktion wird ein zu den Umweltparametern passender „Sollwert“ berechnet. Diesem Sollwert folgt nun die Blattleitfähigkeit mit einem spezifischen Zeitverhalten nach. Das Zeitverhalten repräsentiert den Prozess, der in diesem System betrachtet wird - die

hydraulischen Öffnungs- und Schließbewegungen der Schließzellen. Das artspezifische Zeitverhalten dieser Bewegungen bestimmt maßgeblich die Systemantwort auf die Änderungen in der Steuerfunktion.

Subsystem 2: CO₂-Aufnahme

Die CO₂-Aufnahme des Blattes soll abgebildet werden. Dazu wird ein intrazellulärer CO₂ Speicherpool verwendet, der nach dem *source-sink* Prinzip arbeitet. Als Hauptquelle dient der Umgebungspartialdruck des CO₂ welcher durch die Blattleitfähigkeit reguliert ist. Daneben existiert eine alternative CO₂-Quelle, die über die Atmung dem System weiteren Kohlenstoff zuführt. Als Verbraucher dient die CO₂-Fixierung, die das dritte Subsystem bildet. Im Modell ist dieser Speicherpool nicht mit der Atemhöhle des Blattes identisch. Vielmehr repräsentiert c_i einen hypothetischen Speicherpool, der voraussetzt, dass es eine homogene Verteilung des CO₂-Partialdrucks im Blatt gibt.

Der intrazelluläre CO₂-Speicherpool ist ein Bindeglied zwischen den verschiedenen Organisationsstufen des Organs „Blatt“. Die Blattleitfähigkeit ist aufgrund der Messmethode eine Eigenschaft des ganzen Blattes, während in der Realität die CO₂-Fixierung, eine Funktion des Chloroplasten ist. Diesem Umstand wird man letztlich durch die Annäherung gerecht, dass man das Blatt als ein Gebilde ansieht, in dem eine homogene Verteilung von CO₂ und weiteren Metaboliten möglich ist. Auch wenn Evans und v. Caemmerer (1996) Methoden und Formeln erarbeitet haben, mit denen die Diffusion im Blatt beschrieben werden kann, stellt die Vereinfachung eine elegante Methode dar, die Prozesse, welche auf verschiedenen Organisationsebenen des Systems „Blatt“ ablaufen, zu integrieren.

Der betrachtete Hauptprozess ist in diesem System die Diffusion des CO₂ von der Umgebung in das Blatt hinein, letztlich bis zum Chloroplasten, wo die CO₂-Fixierung stattfindet. Ein weiterer Prozess, der hier eingreift, ist die Zuführung von Kohlenstoff zum System aus alternativen Quellen wie Zucker oder Stärke über

die Atmung. Kreuzwieser *et al.* (2002) konnten über Markierungsexperimente mit ^{13}C -Glukose nachweisen, dass diese alternativen Kohlenstoffquellen über den Calvin-Zyklus in die Isoprensynthese einfließen und emittiert werden.

Subsystem 3: CO_2 -Fixierung

In diesem System wird die „Licht“- und „Dunkelreaktion“² der Photosynthese abgebildet. Es gibt daher einen lichtabhängigen, regulatorischen Teil, der die Energie für die Synthese der Intermediate im Calvin-Zyklus bereit stellt und einen Teil, in dem unter Verbrauch von Energie ebendiese Intermediate synthetisiert werden. Daneben wird über den Phosphattranslokator ein Austausch von Triosephosphaten zwischen Chloroplast und Zelle realisiert.

Die Prozesse in diesem System sind sehr vielfältig und daher werden hier viele Vereinfachungen und Aggregationen vorgenommen. Der Calvin-Zyklus soll mit fünf Intermediaten (RuBP, PGA, TP, Ru5P und Pi) realisiert werden. Aus lichtabhängigen Reaktionen soll dazu noch ATP und ADP sowie die Reduktionsäquivalente NADP/NADPH gespeist werden. Der TP-Pool ist seinerseits ein Aggregat für alle Triosphosphate des Systems, eine Unterscheidung wird nicht vorgenommen.

Als definitive Prozesse kann man hier die CO_2 -Fixierung nennen, die zu Triosephosphaten führt, den Austausch der Triosephosphate über den Phosphattranslokator und die regenerative Phase des Calvin-Zyklus.

Das Modell soll in einem zweistufigen Prozess entwickelt werden. Dabei wird in einem ersten Schritt mit Hilfe von einem Skelettmodell, das die einfachste Beschreibungen der oben genannten Subsysteme darstellt, versucht, die Strukturgültigkeit des Modells nachzuweisen. Es sollen zunächst nur drei Variablen realisiert werden, die den obigen Subsystemen entsprechen. Anschließend wird dann der Calvin-Zyklus mit den im Subsystem 3 beschriebenen Variablen aufge-

²siehe Hinweis Fußnote 2 in Kapitel 2.

baut.

4.3.5 Modelldiagramm

In der Systemanalyse verwendet man meist zwei verschiedene Arten von Diagrammen und unterscheidet zwischen dem Wirkungsdiagramm und dem Simulationsdiagramm. Während das Wirkungsdiagramm in der Regel die graphische Übersetzung des Wortmodells ist und das System mit seinen Beziehungen zueinander darstellt, ist das Simulationsdiagramm oder auch Blockdiagramm eine graphische Darstellung, die direkt in ein Computerprogramm übersetzbar ist.

Das Wirkungsdiagramm ist das wichtigere von beiden. Es dient der Veranschaulichung des Wortmodells und ist damit direkt mit der Modellstruktur verknüpft. In diesem Diagramm werden meist alle Elemente des Systems mit mehr oder weniger umgangssprachlichen Bezeichnungen aufgeführt. Es eignet sich daher besonders gut zur Vorstellung des Modells und seiner Struktur sowie zur Diskussion über das Modell.

Das Simulations- oder Blockdiagramm verfolgt dagegen einen gänzlich anderen Ansatz. Bei dessen Erstellung sollten schon alle Elemente des Modells bekannt sein. Ebenso sollten die Verknüpfungen, also die Struktur, schon festgelegt sein. Es enthält auch die später im Simulationsprogramm verwendeten Bezeichnungen für die Modellelemente. Daher ist dieses Diagramm zur Überprüfung der Implementierung des Simulationsprogramms geeignet und dient weniger zur Veranschaulichung des Modells.

Ich verwende in dieser Arbeit einen hybriden Ansatz. Zum einen ist es hauptsächlich ein Wirkungsdiagramm und soll die Modellstruktur beschreiben. Zum anderen verwende ich jedoch schon hier Bezeichnungen, die sich später im Simulationsprogramm wiederfinden.

Im oberen Drittel von Abb. 4.1 sind die Triebkräfte und die davon beeinflussten Regulationsfunktionen dargestellt. Im linken Teil ist, mit durchgezogenen

Linien, die Regulation der Blattleitfähigkeit dargestellt. Der rechte Teil zeigt mit gestrichelten Linien den Einfluss der Triebkräfte auf die Biochemie.

Im mittleren Bereich ist dann der Gasaustausch über die Stomata dargestellt und der intrazelluläre CO_2 -Pool, der zudem eine Verbindung zu alternativen Kohlenstoffquellen hat.

Der untere Bereich zeigt die biochemische CO_2 -Fixierung mit Schlüsselintermediaten des Calvin-Zyklus und dem Phosphattranslokator. Daneben ist auch angedeutet, dass sich dieser Prozess in verschiedenen Zellkompartimenten abspielt.

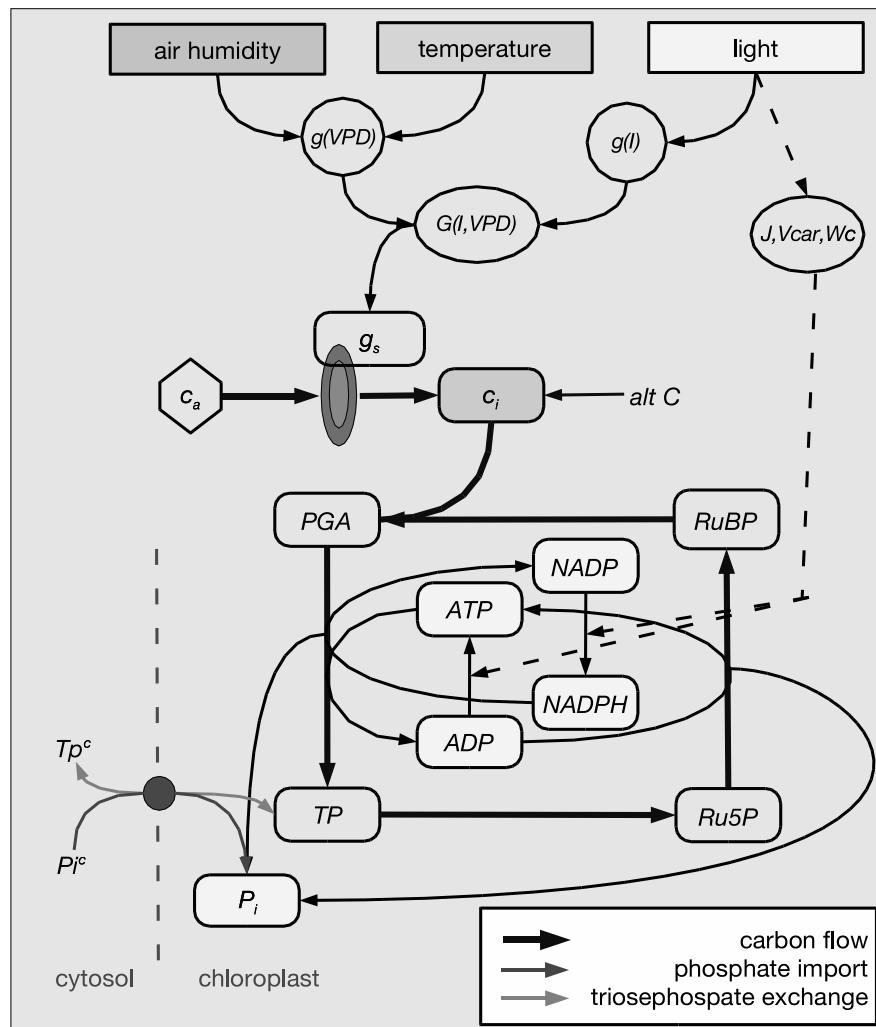


Abbildung 4.1: Modelldiagramm des Blattphotosynthesemodells mit der detaillierten Beschreibung des Calvin-Zyklus. Ausgehend von den ganz oben dargestellten Umwelteinflüssen (Luftfeuchte, Temperatur und Licht) werden die Regelfunktionen ($g(VPD)$, $g(l)$) und die Steuerfunktion ($G(l, VPD)$) der Blattleitfähigkeit (g_s) sowie die lichtabhängigen Reaktionen des Calvin-Zyklus (J , $Vcar$, Wc) berechnet. Diese Regulieren über g_s und die Carboxylierungsrate den c_i -Pool. Mit $RuBP$, PGA , TP , $Ru5P$, P_i , ADP/ATP und $NADP/NADPH$ sind Schlüsselintermediate des Calvin-Zyklus dargestellt. Den Austausch von Phosphat und Triosephosphaten zwischen Chloroplast und Cytosol vermittelt der Phosphattranslokator.

Kapitel 5

Die Modellierung der Blattleitfähigkeit

5.1 Einleitung

Die Blattleitfähigkeit als Eigenschaft des Systems „Blatt“ wird durch das Zusammenspiel der Zellen des Spaltöffnungsapparates (Schließzellen und Nebenzellen) bestimmt. Zum Öffnen der Spalten wird in den Schließzellen der Turgor erhöht, was aufgrund der speziellen Form der Zellwände bei den Schließzellen (vgl. Sitte *et al.*, 1993) zur Ausbildung eines Spaltes zwischen den paarig angeordneten Zellen führt. Die Erhöhung des Turgors ist auf eine Erhöhung des osmotischen Potentials zurückzuführen, was einen Einstrom von Wasser in die Schließzellen zur Folge hat. Die Regulation dieser Öffnungsbewegungen wird sowohl von externen als auch internen Faktoren bestimmt.

Ein Modell der Blattleitfähigkeit muss also sowohl die Dynamik der Öffnungsbewegungen als auch deren Regulation durch äußere und innere Größen beinhalten. Das hier vorgestellte und untersuchte Modell enthält einige der Komponenten, die die Blattleitfähigkeit bestimmen. Es wird zudem untersucht, welches das einfachste Modell ist, mit dem man adäquate Vorhersagen zu gegebenen Messwer-

ten erzeugen kann.

5.2 Regulationsfaktoren für das Modell der Blattleitfähigkeit

Die Blattleitfähigkeit g_s wird von vielen Faktoren beeinflusst. Neben externen Größen wie Licht, Temperatur, Luftfeuchte und Wasserversorgung sind zudem noch interne Größen wie Wasserpotential, Osmolarität, Kalziumgehalt, pH-Wert oder biochemische Botenstoffe und Phytohormone wichtige Faktoren, die das Öffnungs- und Schliessverhalten der Stomata beeinflussen.

Einige dieser Faktoren spielen immer eine Rolle, andere jedoch nur in speziellen Situationen. So ist die Regulation durch Licht eine essentielle Größe, die das gesamte Regelnetzwerk beeinflusst, während zum Beispiel ABA vor allem bei Trockenstress in das Regelnetzwerk eingreift.

Nach wie vor sind nicht alle Einflussgrößen, welche die Blattleitfähigkeit regulieren, detailliert erfasst. Neben der reinen Aufzählung der Faktoren besteht die Hauptproblematik darin, dass es nicht bekannt ist, wie die einzelnen Einflussgrößen zusammenwirken. Ebenso ist in den meisten Fällen keine oder nur sehr wenig Information über die Sensoren der einzelnen Faktoren bekannt.

Aufgrund dieser Problematik werden für die prozessorientierte Modellierung in der Regel alle die Faktoren verwendet, die man erfassen kann und deren Zusammenspiel in Teilen rekonstruierbar erscheint.

5.2.1 Licht

Der Einfluss des Lichts auf die Blattleitfähigkeit ist in vielen Fällen beschrieben (Kirschbaum *et al.*, 1988; Lösch, 2001). Mittels Dosis-Effekt Kurven lässt sich ein hyperbolischer Verlauf festlegen. Dieses Verhalten hat die Konsequenz, dass ab einem bestimmten Öffnungsgrad eine weitere Erhöhung der Lichtintensität zu

keiner nennenswerten Änderung in der Öffnungsweite führt.

Obwohl in diesem Bereich viele Anstrengungen unternommen werden, sind längst nicht alle Mechanismen der Regulation der Blattleitfähigkeit durch das Licht bekannt oder verstanden.

5.2.2 Temperatur

Die Temperatur wirkt in einer vielschichtigen und komplexen Weise auf die Blattleitfähigkeit ein. Daher gibt es mehrere Aspekte des Temperatureinflusses auf die Blattleitfähigkeit. Der wichtigste Einfluss der Temperatur dürfte jedoch die Erhöhung der Transpirationsrate sein. Diese führt zu einer Verringerung der Blattleitfähigkeit, da die Pflanze, versucht dem Wasserverlust entgegenwirken. Letztlich hängt jedoch die Transpirationsrate noch von weiteren Faktoren wie der Luftfeuchte und dem Wasserpotential der Pflanze ab. Auch die enzymatischen Reaktionen der Schließzellen sind temperaturabhängig.

Da die Temperatureinflüsse so vielschichtig sind, ist es in der Regel nicht einfach, diese zu beschreiben. Im Einzelfall wird man also die eventuell möglichen Messdaten einzelner temperaturabhängiger Prozesse beachten müssen. Hat man keine Möglichkeit solche Daten zu erheben, so kann man versuchen typische publizierte Zusammenhänge (Lösch, 2001) zu verwenden.

5.2.3 Luftfeuchte

Die Luftfeuchte selbst ist eine sehr stark von der Lufttemperatur geprägte physikalische Größe die auf die Blattleitfähigkeit einwirkt. Bei trockener Luft erhöht sich die Transpirationsrate der Blätter und bewirkt somit eine Erniedrigung der Blattleitfähigkeit. Ist die Luft mit Wasserdampf gesättigt, wird eine Öffnung der Stomata ermöglicht. Versuche, bei denen trockene Luft auf die Blattoberfläche geblasen wird, zeigen, dass dies einen sehr starken Einfluss auf die Blattleitfähigkeit hat. Dies führt bis zum kompletten Verschließen der Stomata.

Der Einfluss, den die Luftfeuchte auf das Blatt und die Blattleitfähigkeit ausübt, hängt stark von der herrschenden Luftströmung ab. Da Luftströmungen im allgemeinen turbulent sind, ist es nicht trivial, eine adäquate Beschreibung für diesen Vorgang zu finden.

5.2.4 Wasserdampfdruckdefizit

Wie in den beiden letzten Abschnitten beschrieben, ist es relativ schwierig mittels Temperatur und Luftfeuchte passende Ausdrücke für deren Einflüsse auf die Blattleitfähigkeit zu formulieren. Allerdings baut sich über den Temperaturgradient zwischen Blatt (T_{Blatt}) und Umgebung, repräsentiert durch die Taupunkttemperatur¹ (T_τ), auch ein Luftfeuchtegradient auf. Ein sinnvolles Maß für die Luftfeuchte, ist zum Beispiel der temperaturabhängige Sättigungsdampfdruck $e(T)$. Mit diesem ist es nun möglich, einen Luftfeuchtegradient in Abhängigkeit vom Temperaturgradienten zu formulieren.

Nimmt man wie bei Kirschbaum *et al.* (1988) oder Lösch (2001) an, dass die Luft im Blatt mit Wasserdampf gesättigt² ist, so kann man die jeweiligen Wasserdampfpartialdrücke als Funktion von T_{Blatt} und T_τ berechnen. Deren Differenz bezeichnet man nun als Wasserdampfdruckdefizit (VPD ³). Dieses kann einfach durch Messen der Blatt- und der Taupunkttemperatur errechnet werden.

Mit wachsendem VPD steigt bei gleichbleibender Blattleitfähigkeit die Transpirationsrate an. Um einen übermäßigen Wasserverlust zu vermeiden, reagiert die Pflanze üblicherweise mit einer Verringerung der Blattleitfähigkeit. Yong und Farquhar (1997) sowie Schultz und Matthews (1997) beschreiben diesen Einfluss

¹Der Taupunkt definiert die Temperatur, ab welcher die in der Luft enthaltene Feuchtigkeit als Tautröpfchen ausfällt. Damit definiert die Taupunkttemperatur also auch den Temperaturwert, bei dem Wasserdampfsättigung vorliegt.

²Wasserdampfsättigung bedeutet, dass die relative Luftfeuchte $rH = 100\%$ ist. Wegen der Temperaturabhängigkeit besitzen unterschiedlich warme, wasserdampfgesättigte Luftmassen verschiedene Partialdrücke, obwohl in allen Fällen die relative Luftfeuchte gleich 100% ist.

³vom englischen *vapour pressure deficit*

des VPD auf die Blattleitfähigkeit.

5.3 Regulation der Blattleitfähigkeit durch Umweltfaktoren

In diesem Abschnitt möchte ich auf die Regulation der Blattleitfähigkeit durch Umweltfaktoren eingehen. Leider ist eine erschöpfende Diskussion aller Regelmechanismen in dieser Arbeit nicht möglich. Es würde den Umfang bei weitem sprengen. Eine sehr vollständige Übersicht über diese Mechanismen gibt wieder Lösch (2001).

Bei dem hier vorgestellten Modell der Blattleitfähigkeit sollen die wichtigsten Regelmechanismen beschrieben werden. Dies sind die Abhängigkeit vom Licht I und dem temperaturabhängigen Wasserdampfdruckdefizit VPD . Durch die Betrachtung von VPD als regelnden Faktor, hat man implizit schon einen Einfluss der Temperatur auf die Blattleitfähigkeit erfasst.

5.3.1 Modellannahmen der Regulation

Als Annahmen für das Modell gehe ich davon aus, dass ein Lichtfluss zu einer Öffnung der Schließzellen führt und Dunkelheit ein Verschließen bewirkt. Desweiteren nehme ich an, dass die Pflanzen keinem Trockenstress unterliegen und daher die Wasserversorgung der Blätter ausreichend ist. Ein Temperatureinfluss der enzymatischen Reaktionen in den Stomata wird vernachlässigt. Dieser Einfluss spielt am Tag so gut wie keine Rolle. Neben dem Licht spielt dann die Luftfeuchte, und hier speziell das Wasserdampfdruckdefizit, die Hauptrolle in der Regulation der Blattleitfähigkeit. Die blattinterne CO_2 -Konzentration hat zwar bei hohen Werten einen Einfluss auf die Blattleitfähigkeit, so dass in diesem Fall die Blattleitfähigkeit geringer wird, aber auch dieser Effekt ist verglichen mit denen von Licht und VPD zu vernachlässigen. Phytohormonausschüttungen und

Giftstoffe sollen für diese Betrachtung ebenfalls ausgeschlossen sein.

Mit diesen Vorgaben kann man folgendes Regelprinzip beschreiben:

- Hohe Lichtflüsse (PAR)⁴ führen zu einer Öffnung der Schließzellen.
- Geringer Lichtfluss führt zum Verschließen der Stomata und somit zu einer geringen Blattleitfähigkeit.
- Hohe Blattemperatur und geringe Luftfeuchte führen zu einem hohen VPD und damit vorübergehend zu einer höheren Transpirationsrate. Die Pflanze reagiert darauf mit einer Verringerung der Blattleitfähigkeit.
- Hohe Luftfeuchte bei geringen Blattemperaturen führt dann wieder zu einer größeren Blattleitfähigkeit.

Des weiteren nehme ich an, dass die Einflüsse von I und VPD unabhängig voneinander beschrieben werden können (Lösch, 2001; Jarvis, 1976). Mit dieser Annahme kann man nun zwei unabhängige Regelfunktionen $\gamma(I)$ und $\gamma'(VPD)$ definieren. Deren Einfluss auf die Blattleitfähigkeit kann man wiederum als eine Funktion G darstellen. Es gilt dann,

$$G(I, VPD) = \tilde{G}(\gamma(I), \gamma'(VPD)). \quad (5.1)$$

Über die Funktion \tilde{G} ist zunächst nichts gesagt, es kann daher eine jeweils an das Problem angepasste Funktion gewählt werden.

5.3.2 Abhängigkeit vom Licht

Die Lichtabhängigkeit wird, wie schon gesagt, durch eine hyperbolische Sättigungskurve beschrieben. Im einfachsten Fall nimmt man an, dass man analog der

⁴vom englischen *Photosynthetically Active Radiation*. PAR wird über die Quantenflussdichte (PPFD – *Photosynthetic Photon Flux Density*) bestimmt. Der Zusammenhang von PAR zu PPFD ist definiert als die Anzahl der Mole von Photonen, die im Bereich einer Wellenlänge von 400 nm und 700 nm eingestrahlt werden.

Michaelis-Menten Kinetik eine „Substratsättigung“ beschreiben kann. Das Substrat ist in diesem Fall der Lichtfluss. Dies führt zu einer Gleichung der Form:

$$\gamma_{MM}(I) = \frac{\lambda I}{k + I}. \quad (5.2)$$

Der Parameter λ entspricht der maximalen lichtabhängigen Blattleitfähigkeit und k dem Lichtfluss, bei dem die halbmaximale Blattleitfähigkeit erreicht wird.

Allerdings beschreibt Gleichung 5.2 die typische Abhängigkeit der Blattleitfähigkeit vom Licht nicht exakt. Eine bessere Beschreibung liefert die erweiterte Michaelis-Menten-Form nach Thornley und Johnson (1990). Diese in der Literatur auch als „*non-rectangular*“ Hyperbel bezeichnete Sättigungskurve entsteht, wenn man voraussetzt, dass eine vom Licht abhängige enzymatische Reaktion vorliegt, die zudem noch von Diffusionsprozessen des Substrats abhängt. Eine Beschreibung und Herleitung dieser Funktion für Blattphotosynthesemodelle findet sich etwa in Noe (2000). Im allgemeinen Fall ist diese Sättigungskurve als quadratische Gleichung formuliert:

$$\theta\gamma^2 - \gamma(\alpha I + (g_{max} - g_{min})) + \alpha\theta I(g_{max} - g_{min}) = 0. \quad (5.3)$$

Dabei gilt für die Parameter $\alpha > 0 \in \mathcal{R}$ und $\theta \in [0, 1]$. Löst man nun diese Gleichung auf und wählt die negative Wurzel, so ergibt sich für die Anhängigkeit vom Licht die Gleichung

$$\gamma(I) = \frac{\alpha I + (g_{max} - g_{min}) - \sqrt{(\alpha I + (g_{max} - g_{min}))^2 - 4\alpha\theta^2 I(g_{max} - g_{min})}}{2\theta}. \quad (5.4)$$

Abbildung 5.1 zeigt je ein Beispiel für $\gamma_{MM}(I)$ und $\gamma(I)$. Die Kurven wurden aus Messdaten mittels nichtlinearer Regression ermittelt. Die Daten wurden von der Gruppe um Schnitzler und Zimmer im Jahr 1998 ermittelt. Über die nichtlineare Regression erhält man Schätzwerte für die Parametrisierung der

Sättigungsfunktionen. Die Ergebnisse der Regression sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

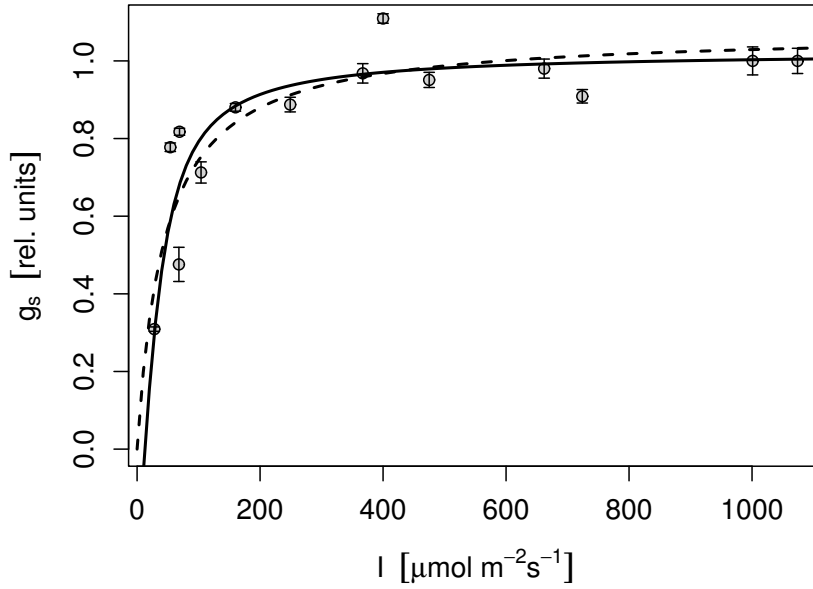


Abbildung 5.1: Schätzung der Parameter mit einer Dosis-Effekt-Kurve für die Blattleitfähigkeit $g_s = f(I)$. Dargestellt sind normierte Messwerte von g_s als Funktion des Lichtflusses bei Eichenblättern. Die gestrichelte Linie zeigt eine nichtlineare Regression mit Michaelis-Menten Kinetik (Gleichung 5.2) und die durchgezogene Linie eine nach Thornley und Johnson (1990) erweiterte Form (Gleichung 5.4). g_s ist durch Normierung mit $g_s = g_{\text{data}}/g_{\text{max,data}}$ dimensionslos.

Wie zu erwarten, sind die Ergebnisse der Regression für $\gamma(I)$ etwas besser als für $\gamma_{MM}(I)$. Die Parameterwerte für λ und g_{max} liegen beide sehr nahe bei Eins, was wegen der Normierung der exakte Wert dieser beiden Parameter sein sollte. Daneben ist bei der erweiterten Form $\gamma(I)$ der Parameter g_{min} negativ, was in der Natur nicht vorkommt. Man kann unter Beachtung des Fehlers aber ein Intervall angeben, mit $g_{\text{min}} \in [0, 0.6]$. Ebenso ist es möglich, Intervalle für die weiteren Parameter anzugeben, und man erhält $\alpha \in (0, 0.086]$ und $\theta \in [0.19, 1]$.

Tabelle 5.1: Regressionsergebnisse für Dosis-Effekt Kurven der normierten Blattleitfähigkeit in Abhängigkeit vom Lichtfluss.

Funktion	Parameter	Schätzwert	Fehler	s^2	s
$\gamma_{MM}(I)$	λ	1.0748	± 0.035	0.06	0.071
	k	44.42	± 7.35		
$\gamma(I)$	α	0.0282	± 0.0582	0.041	0.064
	θ	0.683	± 0.495		
	g_{max}	1.024	± 0.043		
	g_{min}	-0.325	± 0.928		

Da für die folgenden Jahre (1999 und 2000) keine derartigen Labordaten vorlagen, wurde versucht, aus den gemessenen Tagesgängen entsprechende Parameter abzuleiten. Im Falle der vorgestellten Sättigungsverläufe bedeutet das, dass die Messdaten von der entsprechend parametrisierten Kurve „eingehüllt“ werden müssen, da diese die Abhängigkeit vom Licht ohne Einfluss weiterer Größen wie Wasserdampfdruckdefizit oder Temperaturabhängigkeit repräsentieren sollen.

Damit eine möglichst flexible Parametrisierung möglich ist, werden auch hier die Messwerte normiert. Damit liegen dann ebenso die Parameter λ und g_{max} fest und erhalten den Wert Eins. Ebenso wird der Parameter $g_{min} = 0.04$ gesetzt und liegt damit etwa in der Mitte des ermittelten möglichen Wertintervalls. Nun sind noch die Parameter α und θ frei zum Anpassen an die Messdaten.

Bildet man Mittelwerte für die in den Abbildungen 5.2 und 5.3 aufgeführten Parameterwerten, so erhält man für die Daten der Jahre 1999 und 2000 die Werte $\bar{\alpha} = 0.01$ und $\bar{\theta} = 0.9$.

Die Werte wurden alle durch Messungen mit Eichen (*Quercus robur*) ermittelt. Allerdings sind diese Werte mit weiteren Daten zur Blattleitfähigkeit kompatibel.

Tabelle 5.2: Vergleich der Parameterwerte für α und θ bei verschiedenen Spezies.

Spezies	Quelle	α	θ
<i>Quercus robur</i>	diese Arbeit	0.01	0.9
<i>Alocasia macrorrhiza</i>	Kirschbaum et al. (1988)	0.0088	0.866
	Kirschbaum et al. (1998)	0.0064	0.9

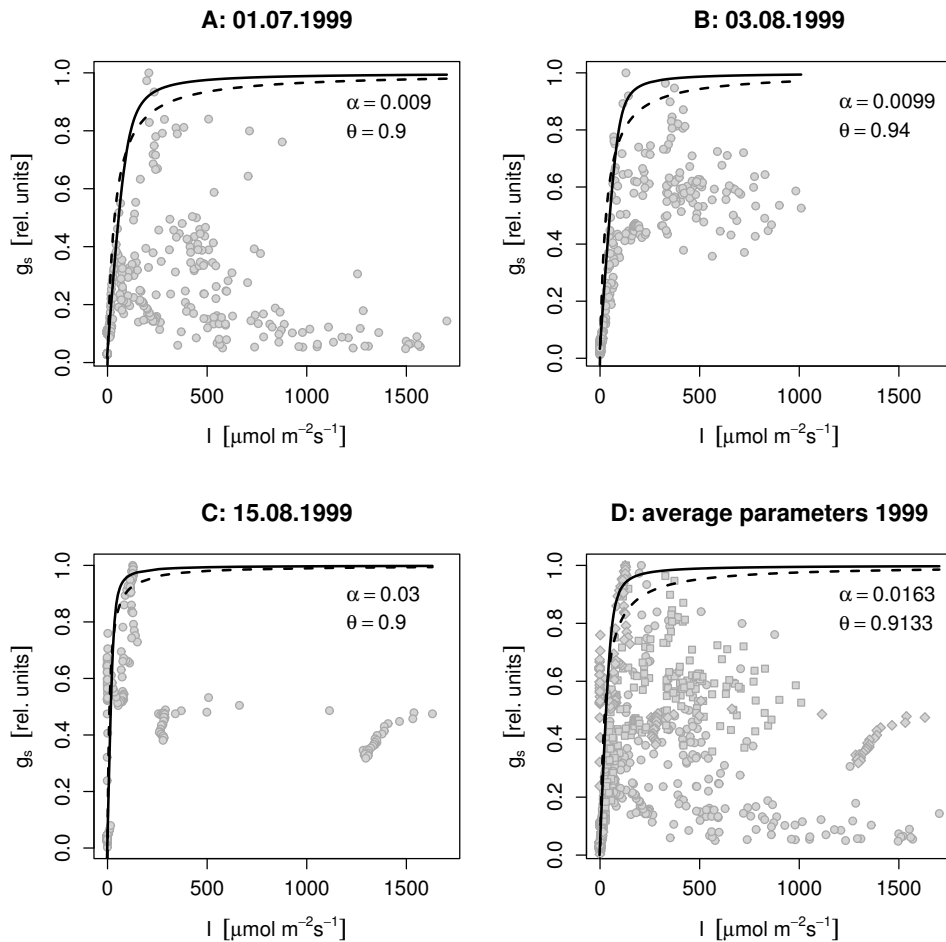


Abbildung 5.2: Schätzung der Parameter für die Abhängigkeit der Blattleitfähigkeit $\gamma(I)$ (Gl. 5.4) vom Licht für das Jahr 1999. Die Parameter α und θ wurden in A, B und C empirisch so gewählt, dass $\gamma(I)$ die Messdaten einhüllt. In D wurden alle Messdaten zusammen geplottet und für die Parameter α und θ wird das arithmetische Mittel gebildet. Zum Vergleich ist die Sättigungskurve nach Michaelis-Menten (gestrichelt) mit eingezeichnet.

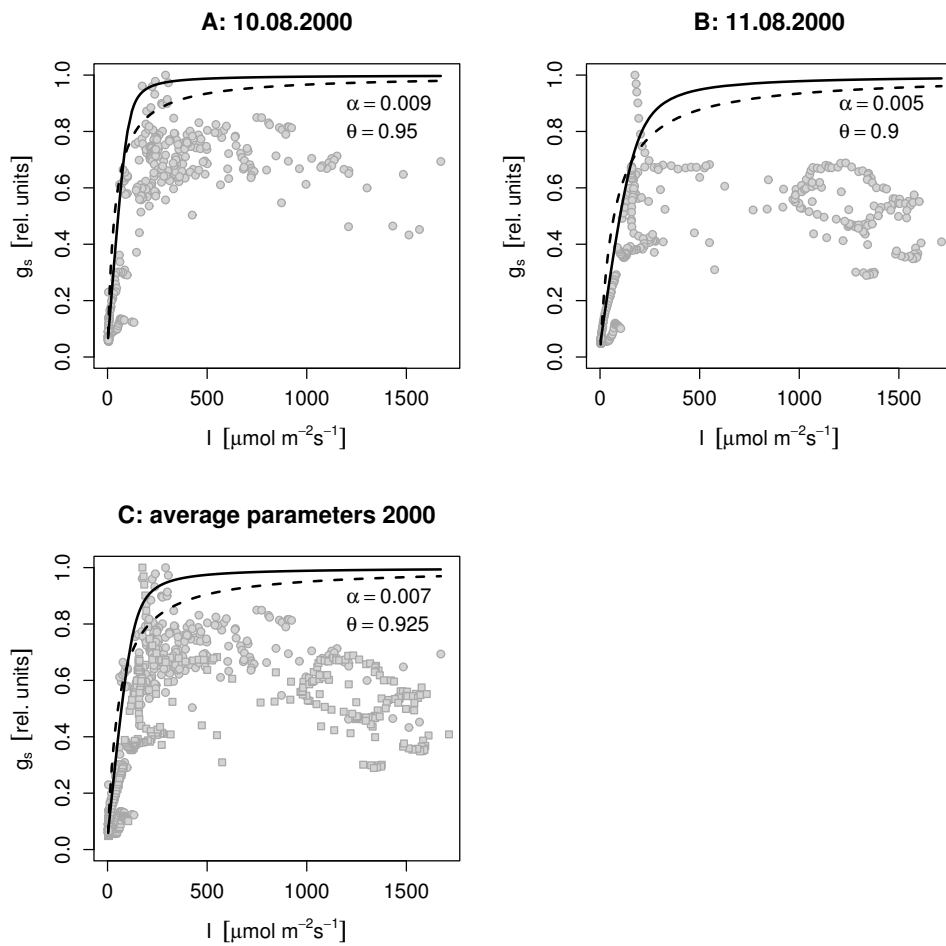


Abbildung 5.3: Schätzung der Parameter für die Abhängigkeit der Blatteleitfähigkeit $\gamma(I)$ vom Licht für das Jahr 2000. Analog Abb. 5.2 sind in A und B die Parameter α und θ empirisch ermittelt und in C das arithmetische Mittel aus A und B. Zum Vergleich ist der Verlauf von Gl. 5.2 (gestrichelt) aufgezeichnet.

5.3.3 Abhängigkeit vom Dampfdruckdefizit

Der Einfluss des Wasserdampfdruckdefizits VPD auf die Blattleitfähigkeit kann man nach Yong und Farquhar (1997) und Schultz und Matthews (1997) über einem reziproken Zusammenhang beschreiben. Damit eine möglichst flexible Parametrisierung dieses Zusammenhangs hergestellt werden kann verwende ich die folgende Funktion:

$$\gamma'(VPD) = \frac{\delta}{|VPD|^N} \quad (5.5)$$

In Abbildung 5.4 sieht man, wie die Parameter die Kurve beeinflussen. Während δ die gesamte Kurve verschiebt und auch über die Form bestimmt, verändert N im wesentlichen die Steilheit der Flanken der Kurve.

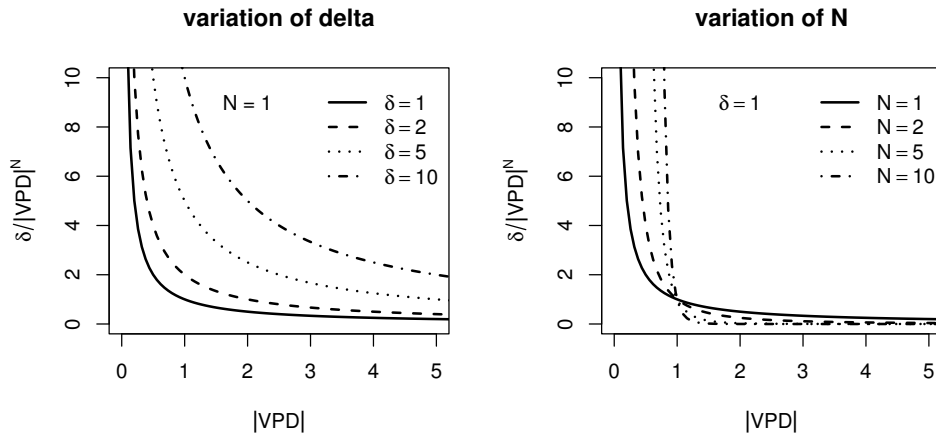


Abbildung 5.4: Die Variation der Parameter von $f = \delta/|VPD|^N$. Durch Variation von δ wird der gesamte Kurvenverlauf beeinflusst. Der Einfluss von N betrifft im wesentlichen die Steilheit der Flanken.

In Gleichung 5.5 taucht der Absolutbetrag des Wasserdampfdruckdefizits im Nenner auf. Dies ist dadurch motiviert, dass ich am Betrag der Differenz der beiden Partialdrücke interessiert bin. Dadurch verliert man die Information über die Richtung des Gradienten. Allerdings ist die Richtung des Gradienten in meinem Modell schon durch die Annahme der Wasserdampfsättigung im Blatt festgelegt

und somit ist der Verlust dieser Information nicht wichtig.

Die Bestimmung der Parameter δ und N gestaltet sich etwas schwieriger als bei der Abhängigkeit vom Licht, weil für VPD keine Labormessdaten vorliegen. Als Lösung kann man sich einen Datensatz aus den Tagesgangmessungen generieren. Dazu habe ich alle Tagesgänge des Jahres 1999 verwendet und immer Werte für g_s gesucht, die in etwa bei gleicher Lichtstärke, aber an verschiedenen Messzeitpunkten liegen. Die gewählte Lichtstärke ist $440 \mu\text{mol m}^{-2}\text{s}^{-1}$ und die Werte dürfen von $400 - 480 \mu\text{mol m}^{-2}\text{s}^{-1}$ schwanken. Vergleicht man die Abhängigkeit der Blattleitfähigkeit vom Licht in diesem Bereich (Abb. 5.1 etwa), so liegt dieser schon im Sättigungsbereich nahe der maximalen Blattleitfähigkeit. Es ist daher nur ein geringer Effekt von der Lichtsteuerung zu erwarten.

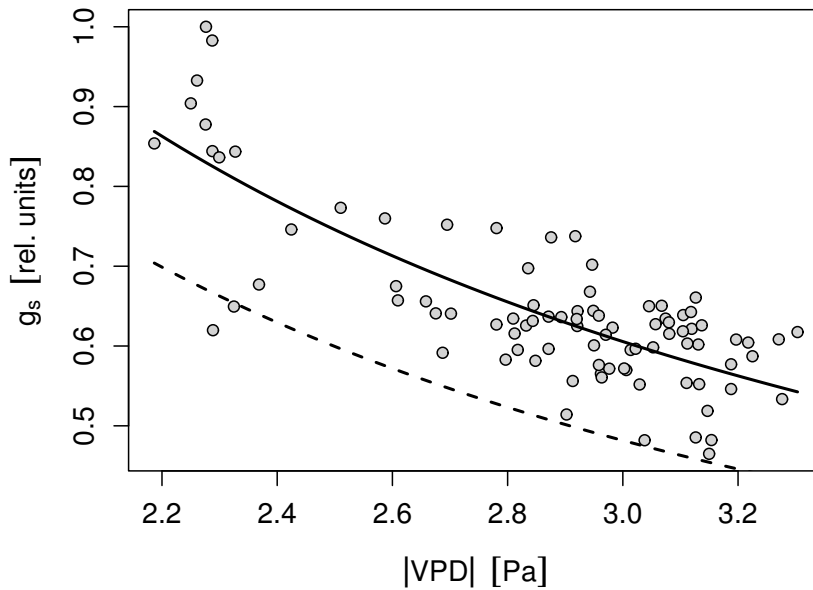


Abbildung 5.5: Nichtlineare Regression zur Schätzung der Parameter δ und N für den Einfluss von VPD auf die Blattleitfähigkeit. Der dazu verwendete Datensatz ist aus den Tagesgängen von 1999 zusammengestellt. Die gestrichelte Kurve zeigt die untere „Einhüllende“, die sicherstellt, dass für fast alle Werte von $|VPD|$ die Funktion $\gamma'(VPD) < 1$ ist.

Die Regression gibt einen ersten Hinweis, in welchem Bereich die Parameter δ und N zu liegen kommen. Ähnlich wie bei der Lichtabhängigkeit ist aber eine Parametrisierung interessant, bei der ein „idealer“ Verlauf für den Einfluss von VPD auf die Blattleitfähigkeit angenommen wird. Betrachtet man normierte Messdaten, wie in Abbildung 5.5, so gilt $\gamma'(VPD) \leq 1$ für fast alle Werte von $|VPD|$. Die gestrichelte Linie in der Abbildung zeigt eine Kurve, die diese Forderung erfüllt. Da keine Labordaten vorliegen, bei denen ausser VPD alle anderen Faktoren konstant gehalten wurden, sollte man bei der Parameterschätzung hier keine „scheinbare Genauigkeit“ erzeugen. Daher ist es ausreichend, wenn man die Parameter so wählt, dass fast alle Werte oberhalb der Kurve zu liegen kommen. Die Parameter für diese einhüllende Kurve sind $\delta = 1.8$ [kPa] und $N = 1.2$.

Tabelle 5.3: Regressionsergebnisse für die reziproke Abhängigkeit der normierten Blattleitfähigkeit vom Wasserdampfdruckdefizit.

Funktion	Parameter	Schätzwert	Fehler	s^2	s
$\gamma'(VPD)$	δ	2.1	± 0.19	0.366	0.065
	N	1.14	± 0.09		

5.3.4 Die Berechnung des Dampfdruckdefizits VPD

Zur Beschreibung des Dampfdruckdefizits (VPD) nimmt man an, dass die Luft in der Atemhöhle des Blattes mit Wasserdampf gesättigt ist und setzt die relative Luftfeuchte im Blatt auf $r_H = 100\%$. Da in der Regel für mitteleuropäische Klimaverhältnisse die relative Luftfeuchte der Umgebungsluft kleiner als 100% ist, entsteht somit ein Dampfdruckgefälle zwischen dem Blattinneren und der Umgebung. Wie aus Tabelle 5.4 ersichtlich ist, liegt die durchschnittliche relative Luftfeuchte in Deutschland bei etwa 80%. Da Laubbäume in unseren Breiten meist eine Vegetationsperiode von März/April bis Oktober/November aufweisen,

braucht man die feuchteren Wintermonate nicht beachten und kann das Mittel der rel. Luftfeuchte für die Monate der Vegetationsperiode berechnen. Am Beispiel von Karlsruhe⁵ etwa hätte man für die Vegetationsperiode eine mittlere rel. Luftfeuchte von 72.3% und für die Sommermonate sogar von nur 69%.

Tabelle 5.4: Mittlere relative Luftfeuchte einiger ausgewählter Orte in Deutschland. Quelle: Klimadatenbank des Deutschen Wetterdienstes.

Ort	jährliche rel. Luftfeuchte [%]	Mittelwert (rel. Luftfeuchte [%])
Hamburg	80	79.43
Berlin/Dahlem	77	
Fichtelgebirge	87	
Frankfurt/Main	77	
Karlsruhe	76	
München/Riem	78	
Zugspitze	81	

Über die relative Luftfeuchte allein ist allerdings keine Quantifizierung für den zugehörigen Wasserdampfpartialdruck möglich, da diese das Verhältnis von gemessener Feuchte zur möglichen Sättigung bei der vorliegenden Temperatur angibt. Man benötigt also noch mindestens eine Temperaturmessung. Eine elegante Lösung für dieses Problem ist es, den Taupunkt zu bestimmen und damit dann den Wasserdampfpartialdruck $e(T)$. Streubing und Fangmeier (1992) definieren eine empirische Funktion, mit der dieser Partialdruck aus der Temperatur berechnet werden kann:

$$e(T) = P_{atm} e^{13.3185t - 1.976t^2 - 0.6445t^3 - 0.1229t^4} \quad \text{mit} \quad t = 1 - \frac{373.15}{T}, \quad (5.6)$$

wobei $P_{atm} = 101.325$ [kPa] und T die Temperatur in Kelvin ist. Die Einheit von $e(T)$ ist [kPa]. Das Dampfdruckdefizit kann man nun folgendermaßen definieren:

⁵Die Daten können im Internet unter <http://www.wetter.com> abgerufen werden.

$$VPD = e(T_\tau) - e(T_{Blatt}) \quad (5.7)$$

Dabei ist T_τ die gemessene Taupunkttemperatur der Umgebungsluft und T_{Blatt} die gemessene Blattemperatur.

Unter Verwendung von Gleichung 5.6 erhält man den Sättigungsdampfdruck $e(T)$, der zur Luft der jeweiligen Temperatur T passt. Da per Definition die Luft im Blatt wasserdampfgesättigt ist, und die Messung der Taupunkttemperatur ebenfalls einen Wert für den Sättigungsdampfdruck liefert, kann man somit die Differenz nach Gleichung 5.7 bilden. Diese Differenz ist dann die treibende Kraft für den Transpirationsstrom aus dem Blatt heraus. Hat man ausreichend aufgelöste Messwerte der Luftfeuchte zur Verfügung, so kann es sinnvoll sein, diese immer zu berücksichtigen. Meist jedoch hat man Tages- oder Monatsmittel zur Verfügung, in diesem Fall muss man entscheiden ob diese zusätzliche Information in die Bestimmung als konstanter Faktor mit eingehen soll oder nicht.

Ein weiterer Fall ist gegeben, wenn man Aussagen für zukünftige Klimaszenarien mit modellierten Klimadaten treffen möchte. Falls solche Modelldaten eine Taupunkt- und Blattemperatur vorhersagen können, kann man die Gleichungen ohne weitere Informationen verwenden und erhält ein Dampfdruckdefizit entsprechend der Vorgaben. Hat man nur Daten über die rel. Luftfeuchte und die Blattemperatur, so kann man sich folgendermaßen behelfen:

- Errechne $e^* = e(T_{Blatt})$,
- errechne $e = rHe^*$
- und erhalte damit $VPD = e - e^* = e^*(rH - 1)$

Dabei ist e^* der Sättigungsdampfdruck und rH die relative Luftfeuchte in Prozent.

5.3.5 Die Steuerfunktion $G(I, VPD)$

Pflanzen, die C_3 -Photosynthese betreiben, stecken in einem Dilemma. Während des Tages, wenn die Energieversorgung durch das Sonnenlicht hoch ist, muss der Gasaustausch ermöglicht werden. Dieser führt zur CO_2 -Aufnahme, aber auch zum Wasserverlust. Die Auswirkung der Öffnungsweite der Schließzellen, und damit der Blattleitfähigkeit auf die beiden Prozesse ist jedoch unterschiedlich. Während die Transpiration linear mit der Öffnungsweite einhergeht, ist die CO_2 -Aufnahme durch die biochemischen Vorgänge im Calvin-Zyklus limitiert (Mohr und Schopfer, 1992). Das bedeutet, dass ab einer bestimmten Öffnungsweite wegen der Sättigung der biochemischen CO_2 -Fixierung eine weitere Öffnung keinen Zuwachs der Photosyntheserate mehr bewirkt. Allerdings steigt der Wasserverlust mit gleicher Intensität weiter an. Es ist klar, dass die Pflanze diesem Dilemma nur dann enttrinnen kann, wenn sie eine möglichst effiziente Regelung der Blattleitfähigkeit findet, bei der ausreichend Kohlenstoff aufgenommen werden kann bei gleichzeitig möglichst geringem Wasserverlust. Farquhar und Sharkey (1982) betrachten hierzu ein der Ökonomie entliehenes Prinzip, bei dem eine optimale Blattleitfähigkeit aus der Beziehung zwischen der Evaporation E und der Assimilation A abgeleitet wird. Es wurde angenommen, dass der optimale Leitfähigkeitswert derjenige sei, bei dem gilt, dass $\partial A / \partial E = \text{const.}$ Diese Untersuchungen helfen also bei Fragen wie: „Wie viel Wasser kostet eine bestimmte Photosyntheserate?“ oder „Um wieviel limitiert der Wasserverlust die Assimilation?“. Allerdings helfen diese Untersuchungen wenig bei der Suche nach einer expliziten Funktion, die Gleichung 5.1 erfüllt. Sie sind jedoch hilfreich, um die Güte einer solchen Funktion im Anschluss zu untersuchen.

Mit Gleichung 5.1 wurde eine allgemeine Darstellung für eine Steuerfunktion $G(I, VPD)$ beschrieben. In diesem Abschnitt möchte ich zwei Ansätze vorstellen, die als Funktion in Gleichung 5.1 eingesetzt werden können. Zum einen ist dies die Minimumfunktion und zum anderen eine Produktfunktion. Als wichtige

Voraussetzung muss in beiden Fällen gelten, dass die Funktionen, die den Einfluss durch Licht oder VPD beschreiben, voneinander unabhängig sind. Für die bereits vorgestellten Funktionen $\gamma(I)$ und $\gamma'(VPD)$ gilt dies.

Der Minimumansatz

Unter der genannten Voraussetzung der Unabhängigkeit der Einflüsse von Licht und VPD und der Annahme, dass die Pflanze ausreichend mit Wasser versorgt wird, kann man folgende Funktion definieren:

$$G(I, VPD) = G_{MAX} \min\{\gamma(I), \gamma'(VPD)\}. \quad (5.8)$$

Dabei ist G_{MAX} eine von der betrachteten Spezies abhängige maximale Blatteleitfähigkeit, die aus den Messwerten bestimmt werden kann.

Auch wenn diese Gleichung ein sehr einfaches Aussehen besitzt, sollte man sich über die Eigenschaften, die durch die Verwendung des Minimums der Einflussgrößen zustande kommen, im klaren sein. Zunächst einmal ist eine herausragende Eigenschaft, dass durch die Verwendung des Minimums ein „Umschalteneffekt“ erzeugt wird. Das bedeutet, dass im Verlauf einer Simulation, entsprechend den vorgegebenen Umwelteinflüssen, zwischen Licht und dem Dampfdruckdefizit als unmittelbare Steuergröße für die Blatteleitfähigkeit umgeschaltet wird. In den Messungen konnten solche Effekte beobachtet werden, wie Abb. 5.6 Seite 58 zeigt.

Der Produktansatz

Der Produktansatz hat bei der Modellierung der Blatteleitfähigkeit eine relativ lange Tradition. Ausgehend von der Unabhängigkeitsforderung wurde schon von Jarvis (1976) eine Verknüpfung der Einflüsse als gewichtetes Produkt vorgestellt. Ein weiteres Beispiel findet sich bei Lösch (2001). Man definiert demnach:

$$G(I, VPD) = G_{MAX} \prod w_i \gamma_i \quad (5.9)$$

und im speziellen Fall von nur zwei betrachteten Einflüssen:

$$G(I, VPD) = G_{MAX} w_1 \gamma(I) w_2 \gamma'(VPD). \quad (5.10)$$

G_{MAX} entspricht wieder der maximalen Blatteleitfähigkeit und die w_i sind Gewichtungparameter. Im einfachsten Fall der Gleichgewichtung der Einflussgrößen und bei der Definition, dass für beide Funktionen $\gamma, \gamma' \in [0, 1]$ gilt, können diese Parameter zu eins gesetzt werden und man kann sie weglassen.

Allerdings ist es ebenso möglich, dass die Gewichtungparameter w_i funktionale Zusammenhänge anderer Einflüsse darstellen, die dann die Gewichtungen verschieben können. So kann zum Beispiel der Einfluss des Lichts über den Tag gesehen abnehmen (Zeiger und Zhu, 1998) oder der Einfluss von VPD könnte am Tag höher sein als in der Nacht. Des weiteren beschreiben Snaith und Mansfield (1985, 1986), dass die Blatteleitfähigkeit einen circadianen Rhythmus hat.

5.3.6 Aufbereitung der Eingangsdaten

Das Modell der Blatteleitfähigkeit kann Eingangsdaten⁶ aus verschiedenen Quellen verarbeiten. Dies können entweder gemessene Daten sein oder aus idealisierten Verläufen von Tagesgängen berechnete Werte. Es ist auch möglich, modellierte Daten aus einem meteorologischen Modell zu verwenden. Im Falle der errechneten Werte kann man diese natürlich an die Schrittweite des numerischen Lösungsalgorithmus⁷ anpassen. In den beiden anderen Fällen ist dies nicht ohne weiteres möglich. Üblicherweise verwenden effiziente numerische Integrationsverfahren eine adaptive Schrittweitensteuerung. Daher ist es nicht vorhersagbar, wann und mit welcher Schrittweite auf die Eingangsdaten zugegriffen wird. In diesem Fall ist es sinnvoll, die Eingangsdaten über Splinefunktionen zu realisieren. Diese können zu beliebigen „Zeitpunkten“ während der Simulation abgerufen werden.

⁶Licht, Blattemperatur und Taupunkttemperatur

⁷vgl. auch im Anhang Kap.9.1

Die Verwendung von Splinefunktionen bringt allerdings eine weitere Schwierigkeit in die Lösung des Modells ein, die Güte einer Splinefunktion hängt von der Anzahl der gewählten Teilintervalle⁸ ab (Finckenstein, 1977, 1992; Hämmerlein und Hoffmann, 1992). Da die Approximationsgenauigkeit der Splinefunktion von der Anzahl der Teilintervalle abhängt ist somit auch der Fehler durch die Verwendung des Splines von dieser Anzahl abhängig. Es ist daher zu erwarten, dass durch unterschiedlichen Intervallteilungen der Splines leichte Variationen bei den Eingabedaten auftreten können. Im Fall der Eingangsdaten, die in dieser Arbeit verwendet wurden, liegt der zu erwartende Fehler unter 10^{-4} (Kap. 9.2) und liegt damit unter der Messgenauigkeit der Daten ($\approx 10^{-1}$).

5.4 Das Modell der Blattleitfähigkeit

Wie schon in der Einleitung dieses Kapitels beschrieben, beruht der Öffnungsmechanismus der Schließzellen auf dem Aufbau eines Kaliumgradienten und einer Erhöhung des osmotischen Potentials was dann durch Wassereinstrom eine Öffnung bewirkt. Diese Prozesse sind alle zeitabhängig, so dass man den zeitlichen Verlauf der Blattleitfähigkeit mit Differentialgleichungen beschreiben kann.

Ausgehend von einem bekannten Modell mit drei Variablen nach Kirschbaum *et al.* (1988) soll dieses um die Regulation durch *VPD* erweitert werden. Anschließend wird ein einfacheres Modell mit einer Variablen entwickelt und die beiden Ansätze verglichen.

In einem weiteren Vergleich wird untersucht, welchen Einfluss die Wahl der Steuerfunktion hat. Dazu wird der Minimumansatz mit dem Produktansatz verglichen.

⁸Vergleiche auch Kapitel 9.2 im Anhang.

5.4.1 Das Modell mit drei Variablen

Das Modell mit den drei Variablen entspricht in seinem Aufbau dem von Kirschbaum *et al.* (1988 und 1998) veröffentlichten. Allerdings wurden die Parameter an Eichenblätter angepasst (Zimmer, 2000 und diese Arbeit). Das Modell basiert ebenfalls auf einer Steuerfunktion S_{eq} , welche im Original „nur“ vom Licht abhängt und die *steady-state* Blattleitfähigkeit bei gegebenem Lichtfluss darstellt. Ich ersetze nun S_{eq} durch meine Steuerfunktion $G(I, VPD)$ aus Gleichung 5.8. Dies ist legitim, da auch $G(I, VPD)$ den aktuellen *steady-state* Wert der Blattleitfähigkeit repräsentiert. Mit diesem Wert wird nun ein „biochemisches Signal“ S gesteuert, welches zu einer Änderung des Kaliumgradienten führt. Zu diesem Signal gehören zwei Zeitkonstanten τ_{up} und τ_{down} , die die Öffnungs- oder Schließzeit repräsentieren. Dazu kommen dann noch eine Zeitkonstante τ_K für den Kaliumgradienten und τ_W für den Wasserstrom der dem osmotischen Potential folgt.

Man definiert nun:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{G(I, VPD) - S}{\tau_X} \text{ mit } \begin{cases} \tau_X = \tau_{up} & \text{wenn } S < G(I, VPD) \\ \tau_X = \tau_{down} & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.11.a)$$

$$\frac{dK}{dt} = \frac{S - K}{\tau_K} \quad (5.11.b)$$

$$\frac{dW}{dt} = \frac{K - W}{\tau_W}. \quad (5.11.c)$$

In diesem Modell ist die Änderung der Blattleitfähigkeit letztlich proportional zur Differenz zwischen der Steuerfunktion $G(I, VPD)$ und der Variable S . Die beiden Variablen K und W tragen über ihre jeweiligen Zeitkonstanten nur eine feste Zeitverzögerung zur Dynamik bei .

5.4.2 Modell mit einer Variable

Aus dem Modell mit drei Variablen (Gleichungen 5.11.a-5.11.c) kann man unter den folgenden Annahmen ein Modell mit einer Variablen entwickeln:

- Aufgrund der „kontinuierlichen“ Änderung der Eingangsdaten über einen langen (ein Tag oder länger) Beobachtungszeitraum spielt der Unterschied der verschiedenen Zeitkonstanten für die Öffnung oder das Verschliessen der Stoma keine Rolle. Man kann daher eine einzelne Zeitkonstante verwenden.
- Der Beitrag der beiden Variablen K und W zur Dynamik beschränkt sich auf eine reine Zeitverzögerung der Änderung der jeweiligen Variable davor. Damit kann man alle Zeitkonstanten in einer einzelnen zusammenfassen.

Der Aufbau des Modells mit einer Variable ist dann sehr einfach, wenn man wieder die Änderungen der Blattleitfähigkeit von der Differenz $G(I, VPD) - g_s$ abhängig macht. Es gilt dann:

$$\frac{dg_s}{dt} = k_g(G(I, VPD) - g_s). \quad (5.12)$$

In dieser einfachen Form darf man keine allzu großen Anforderungen an die Zeitauflösung des Modells stellen. Bei der Simulation ganzer Tagesgänge ist dies in der Regel der Fall, so dass diese einfache Beschreibung ausreichend exakte Werte liefern sollte.

5.4.3 Vergleich der beiden Modellansätze

Zum Vergleich wurde mit beiden Modellen für jeweils einen Tag im Jahr 1999 und 2000 eine Simulation durchgeführt. In beiden Fällen werden die berechneten Werte alle 10 Minuten (Simulationszeit) ausgegeben. Die initiale Schrittweite des Lösungsalgorithmus wurde auf 0.1 Minute gesetzt. Der verwendete Lösungsalgorithmus (lsoda, vgl. Cohen und Hindmarsh, 1994) ist allerdings in der Lage, die Schrittweite dynamisch dem Problem anzupassen, sodass die Schrittweite zwar die Rechendauer beeinflussen kann aber keine Genauigkeitsgrenze für den Algorithmus ist.

Neben der Verifizierung, dass beide Modelle in der Lage sind, die Messdaten ausreichend genau anzunähern, wird zudem untersucht, ob das einfachere Modell (Gleichung 5.12) ausreicht, eine dem Modellzweck angemessene Modellantwort zu liefern. Außerdem wird ein Vergleich zwischen den beiden Ansätzen durchgeführt, um festzustellen, ob sie signifikante Unterschiede aufweisen.

Zum Vergleich der Modelle kann man deren Ausgabewerte in Beziehung stellen. Dies entspricht dem Vorgehen, welches man beim Vergleich von zwei Messgeräten anwendet oder bei Eichungen. Die Ausgabedaten beider Modelle gegeneinander aufgetragen sollten der linearen Beziehung $y = x$ genügen und eine lineare Regression zeigt, wie die beiden Modelle korrelieren.

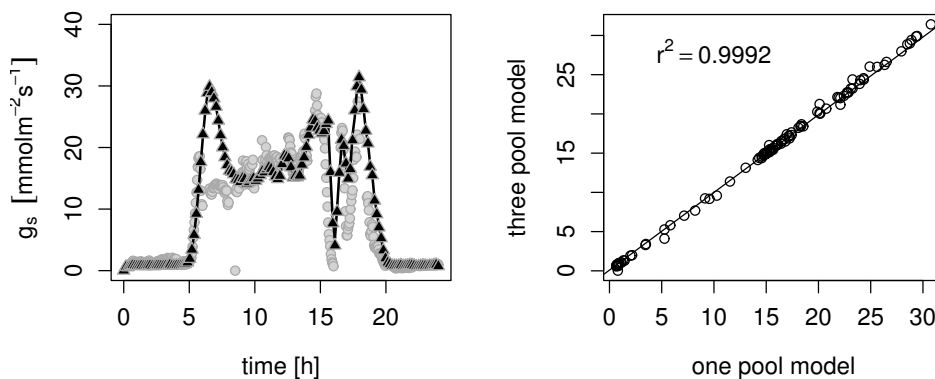


Abbildung 5.6: Vergleich der mit beiden Modellen errechneten Blattleitfähigkeit zu eingangsdaten vom 03.08.99. Die grauen Punkte sind die gemessenen Leitfähigkeiten, die durchgezogene Linie entspricht dem Modelle nach Gleichung 5.12 und die schwarzen Dreiecke dem Modell nach den Gleichungen 5.11.a-5.11.c. In der rechten Hälfte der Abbildung sieht man die Korrelation der mit den Modellen erzeugten Simulationsergebnisse.

Das Simulationsergebnis in Abbildung 5.6 zeigt, dass beide Modellansätze nahezu identische Ergebnisse liefern. Die zeitliche Dynamik ist somit in beiden Fällen fast identisch, was auch der Korrelationskoeffizient $r^2 = 0.9992$ bestätigt.

Der überschwingende *peak* am Morgen ist auf die Regulation des Modells

zurückzuführen. Da bislang „nur“ Licht und VPD an der Regulation beteiligt sind, führt dies zu einer Überschätzung der Zielfunktion $G(I, VPD)$ am Morgen. Allerdings ist dies ein Phänomen, das nur bei diesem Tag auftritt. Dies ist jedoch ein Hinweis, dass die Steuerung der Stomata alleine durch Licht und VPD nicht immer zu exakten Annäherungen an die Messdaten führt.

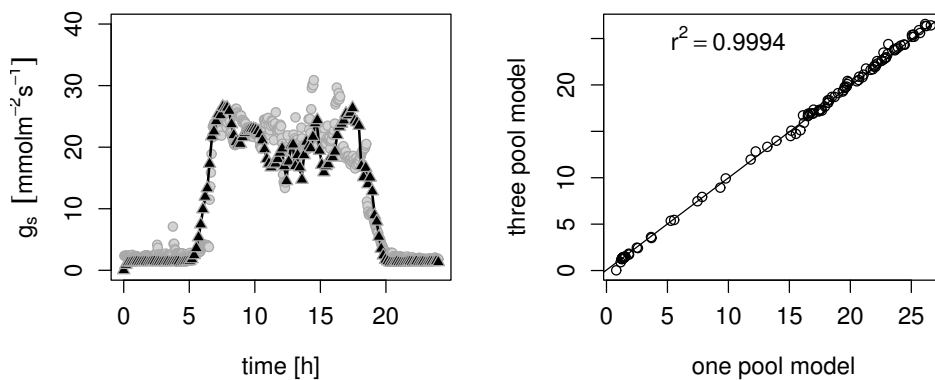


Abbildung 5.7: Vergleich der Blattleitfähigkeit mit beiden Modellen am 10.08.2000. Die Darstellung entspricht der in Abbildung 5.6 gezeigten.

Das Ergebnis der Simulation mit einem Datensatz aus dem Jahr 2000 zeigt, dass die beiden Modelle auch mit diesen Eingangsdaten nahezu identische Werte liefern. Der Korrelationskoeffizient ist mit $r^2 = 0.9994$ sogar noch ein wenig besser.

Beide Modelle liefern für den verwendeten Klimadatenatz eine gute Annäherung an die Messdaten. Am Mittag wird die Blattleitfähigkeit ein wenig unterschätzt und die modellierten Werte liegen im unteren Bereich der gemessenen Werte (Abb. 5.7 links).

Tabelle 5.5: Parameterwerte, die für den Vergleich der beiden Modelle der Blattleitfähigkeit verwendet wurden.

Modell	Parameter	Wert	Einheit
Noe (1 <i>pool</i>)	k_g	0.1	min^{-1}
Kirschbaum (3 <i>pools</i>)	τ_{up}	0.33	min
	τ_{down}	0.6	min
	τ_K	2.4	min
	τ_W	6.6	min

5.4.4 Bewertung der beiden Modellansätze

Beide Modellansätze sind mit geeigneten Parametern gleichermassen in der Lage, ausreichend genaue Annäherungen an die Messdaten der Blattleitfähigkeit zu liefern. Die Korrelationsanalyse, die für die beiden untersuchten Tage in 1999 und 2000 erstellt wurde, ergibt, dass man jeden der beiden Modellansätze verwenden kann. Es gibt praktisch keinen Unterschied im Ergebnis.

Auch die Plots über den Tagesverlauf (Abb. 5.6 und 5.7) ergeben, dass es keinen Vorteil eines Ansatzes gibt. Beide können die Bereiche starker Fluktuationen ausreichend genau beschreiben, speziell die Anstiege am Morgen und den Abfall der Blattleitfähigkeit am Abend. Es lässt sich also trotz der feineren Aufteilung der Zeitkonstanten des Modells mit drei Variablen kein Vorteil in der Dynamik erreichen.

Vor dem Hintergrund dieser Ergebnisse ist es also völlig ausreichend, wenn man das einfachere Modell mit nur einem Kompartiment und nur einer Zeitkonstante verwendet. Dies entspricht der Forderung in Kapitel 4 Abschnitt 3, dass das Modell eine adäquate Beschreibung bei gleichzeitig möglichst geringer Komplexität liefern soll. Aus diesem Grund wird im folgenden ausschließlich mit dem Modell nach Gleichung 5.12 gearbeitet.

5.5 Vergleich zwischen dem Minimum- und dem Produktansatz der Steuerfunktion $G(I, VPD)$

Nachdem im vorherigen Abschnitt untersucht wurde, welchen Einfluss die Struktur des Modells auf die Ergebnisse der Simulation hat, soll nun untersucht werden, in welcher Art und Weise die Modellantwort von der Wahl einer Steuerfunktion $G(I, VPD)$ abhängt.

5.5.1 Simulationsergebnisse des Vergleichs

Das Modell der Blattleitfähigkeit (Gl. 5.12) wurde mit dem Minimumansatz (Gl. 5.8) und dem Produktansatz (Gl. 5.10) für fünf Tagesgänge gelöst. Wegen der Vergleichbarkeit der Ansätze wurden die Gewichtungen w_i in Gleichung 5.10 beide auf eins gesetzt.

Betrachtet man die Ergebnisse in Abbildung 5.8 so fällt zunächst auf, dass der Unterschied zwischen den beiden Steuerfunktionen am Tag nicht allzu groß ist. Dagegen überschätzt der Produktansatz während der Nachtstunden die Messwerte deutlich.

Ebenso sieht man, dass beim Anstieg der Blattleitfähigkeit am Morgen und beim Abfall am Abend der Minimumansatz genauer die Flanken repräsentiert. Für das Jahr 1999 zeigt der Produktansatz zudem, dass er gegenüber dem Minimumansatz einen etwas gedämpfteren Verlauf hat.

Allerdings lässt sich anhand der simulierten Tagesgänge nicht ohne weiteres entscheiden, ob nun Gleichung 5.8 oder 5.10 besser die Messdaten approximiert. Daher wurde eine Abstandsfunktion definiert, die den mittleren Abstand der modellierten Werte von den Messwerten repräsentiert:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n |x_{i,\text{Daten}} - x_{i,\text{Modell}}|}{n} \quad (5.13)$$

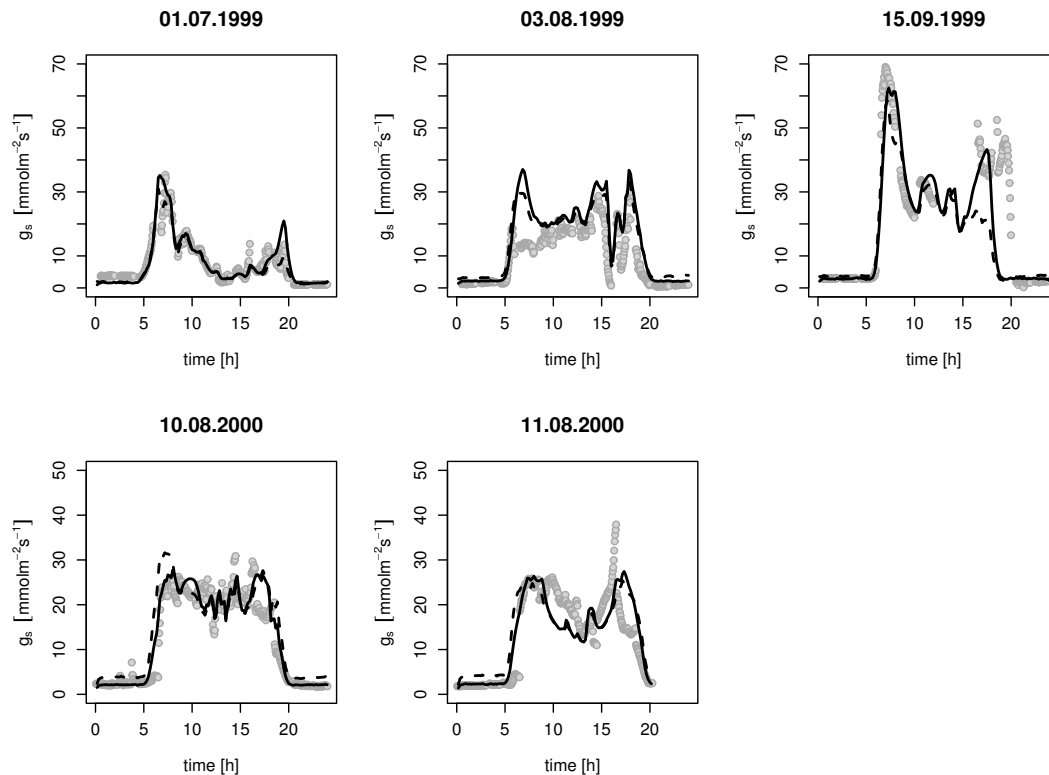


Abbildung 5.8: Vergleich verschiedener Steuerfunktionen für die Blatteleitfähigkeit. Berechnet wurden drei Tage im Jahr 1999 und zwei im Jahr 2000. Die Berechnung nach Gl. 5.8 ist die durchgezogene Linie, während die Berechnung nach Gl. 5.10 gestrichelt dargestellt ist.

Mit dieser Abstandsfunktion kann man nun quantifizieren, wie gut die jeweilige Steuerfunktion die Messdaten approximiert. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.9 gezeigt.

Die Untersuchung der mittleren Abstände ergibt, dass in drei Fällen der Minimumansatz und in zwei Fällen der multiplikative Ansatz zu einer besseren Approximation führt. Allerdings zeigt die Abbildung auch, dass, wenn der minimale Ansatz eine bessere Approximation liefert, diese signifikant besser ist. Speziell bei den beiden Tagen im Jahr 2000 ist dies deutlich zu sehen.

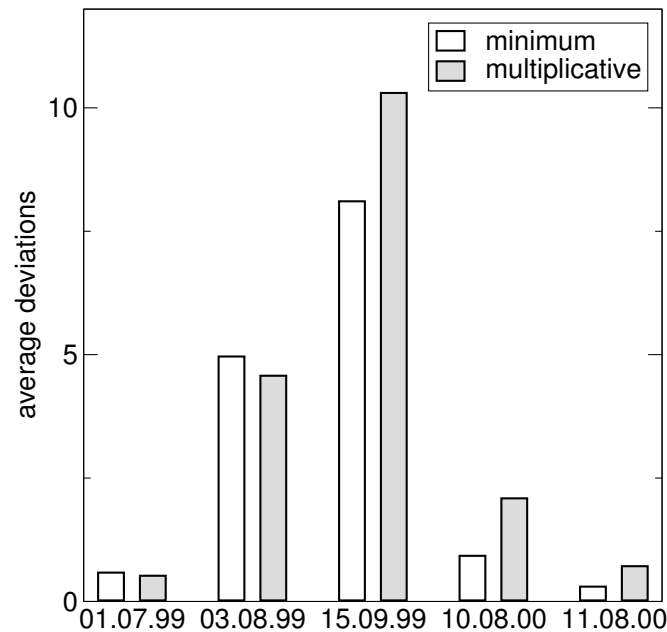


Abbildung 5.9: Mittlere Abweichung der modellierten Blatteleitfähigkeit von den Messdaten nach Gleichung 5.13. Die weißen Balken entsprechen dem Minimumansatz und die hellgrauen Balken dem Produktansatz für die Steuerfunktion.

5.6 Diskussion

Der Aufbau eines Modells der Blatteleitfähigkeit zeigt, dass der entscheidende Faktor für eine gute Approximation der Messwerte die empirische Regulationsfunktion $G(I, VPD)$ ist. Die wichtigen Schritte sind dabei die Parametrisierungen der beiden Abhängigkeitsfunktionen $\gamma(I)$ und $\gamma'(VPD)$. Ein weiterer Faktor ist die Normierung der Abhängigkeitsfunktionen auf das Intervall $[0, 1]$, damit man diese kombinieren kann. Durch die Normierung sind die resultierenden Abhängigkeitsfunktionen dimensionslos und somit ist man frei in der Auswahl, auf welche Art diese Abhängigkeiten kombinierbar sind.

Interessanterweise ist es relativ unerheblich, welches Modell (eine oder drei Variablen) man verwendet. Allerdings ist dies von den Anforderungen an das Modell abhängig. Bei der Modellierung von Tagesgängen ist jedoch dem in dieser Arbeit entwickelten, einfacheren Modell der Vorzug zu geben. Der auf Kirschbaum

(1988) zurückgehende Ansatz mit drei Variablen liefert keine bessere Annäherung unter den geforderten Voraussetzungen.

Die Überprüfung, welche der Möglichkeiten beim Kombinieren der Abhängigkeitsfunktionen von Vorteil sind, fällt auch zugunsten der einfacheren Möglichkeit aus. Allerdings ist es nicht klar, ob bei einer Erweiterung der Regulation um weitere Faktoren das hier gefundene Ergebnis weiterhin Bestand hat. Man muss also bei einer solchen Erweiterung auf diesen Punkt besondere Aufmerksamkeit legen.

Die Frage, wie gut die Messdaten überhaupt von dem vorgestellten Modell approximiert werden, führt letztlich wieder auf die empirische Regulationsfunktion zurück. Je genauer diese in der Lage ist bestimmte Ereignisse zu realisieren, umso besser wird die Approximation werden. Man kann dies relativ gut in Abbildung 5.8 zu sehen. Die Daten am 03.08.1999 werden etwa am Morgen relativ stark überschätzt. An diesem Punkt überwiegt im Modell die Steuerung durch das Licht, während die Messwerte zeigen, dass hier die Pflanze irgendeiner weiteren Restriktion unterliegt. Dies zeigt, dass das Modell noch nicht in allen Facetten komplett ist. Außerdem spielt bei vielen natürlichen Vorgängen die „Historie“ eine Rolle. Das bedeutet, dass unter Umständen durch einen Wassermangel am Vortag oder durch starke klimatische Schwankungen, die Pflanze in einem anderen Zustand ist als der, der vom Modell angenommen wird. Solche Zustände können dadurch simuliert werden, dass man dem Modell ein „Gedächtnis“ mitgibt. Letztlich führt dies dazu, dass man die Parameter nicht als Fixwerte behandelt sondern als Variablen. Diese können dann wieder durch äußere Einflüsse modifiziert werden.

Andererseits zeigt aber auch gerade der 03.08.1999, dass das vorliegende Modell in der Lage ist, eine komplizierte Wetterlage richtig zu approximieren. An diesem Tag fand um ca. 16 Uhr ein Gewitter statt und der Lichtfluss sank auf Werte unter $10 \mu\text{mol Quanten m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ab. Damit geht ein Verschließen der Stomata einher, welches gut durch den Abfall der Blattleitfähigkeit abgebildet ist.

Abschließend kann man feststellen, dass das hier vorgestellte, einfache Modell

eine gute bis sehr gute Approximation der Messdaten liefert. Zur Verbesserung der Vorhersage des Modells muss man die Güte der Abhängigkeitsfunktionen betrachten und die Regulationsfunktion um weitere Faktoren erweitern. Zur Erfassung von längerfristigen Modulationen der Parameter müssten auch solche Messdaten vorliegen.

Kapitel 6

Ein Skelettmodell der Blattphotosynthese

6.1 Einleitung

Der Zweck dieses Skelettmodells besteht darin, die Strukturgültigkeit für den Modellansatz über einen dynamischen c_i -pool zu überprüfen. Ausserdem soll damit der zweite Baustein des in Kapitel 4.3 beschriebenen Blattphotosynthesemodells dargestellt werden.

6.2 Modellbeschreibung des Skelettmodells

Das Skelettmodell enthält, entsprechend der Vorgabe aus Kapitel 4, drei Komponenten, die mit den dort beschriebenen Subsystemen übereinstimmen. Diese sind die Blattleitfähigkeit g_s , der intrazelluläre CO_2 -pool c_i und ein Sammelkompartiment a_{ps} , das die Intermediate des Calvin-Zyklus repräsentiert.

Die Blattleitfähigkeit wird entsprechend Kapitel 5 berechnet. c_i wird explizit als Systemvariable mit einem Quellen- und Senkenterm realisiert. Dabei fließt das Kohlendioxid hauptsächlich aus der Umgebungsluft (c_a) in den c_i -pool hinein

und von dort, über die licht- und temperaturabhängige Carboxylierungsrate gesteuert, in den a_{ps} -pool. Daneben existiert noch eine alternative Kohlenstoffquelle C_R , welche die Atmung¹ repräsentiert. Die alternativen Kohlenstoffquellen werden im Skelettmodell als konstant angenommen. In der Realität ist die Atmung allerdings eine vom Licht und der Temperatur beeinflusste Größe. Die Abhängigkeit der Atmung von der Temperatur wurde von Harley *et al.* (1995) an Soja untersucht. Der Beitrag der Atmung am CO₂-Fluss beträgt nach dieser Untersuchung im Temperaturbereich von 10-50°C zwischen 0 und 4 $\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$. Dies ist, verglichen mit den dort publizierten Carboxylierungsraten ein Unterschied um den Faktor 100 bis 10³. Daher kann man annehmen, dass die Variation im CO₂-Zufluss durch die temperaturabhängige Atmung eine untergeordnete Rolle gegenüber der Variation spielt, die durch das Öffnen und Schliessen der Stomata hervorgerufen wird.

Der Export von Kohlenstoffeinheiten (Triosephosphaten) aus den Chloroplasten wird über eine Senke des a_{ps} -pools realisiert. Im Skelettmodell ist dieser Export als konstanter Abfluss definiert. Der a_{ps} -pool hat eine weitere Funktion, indem er über eine Rückkopplung auf die Carboxylierungsrate seinen Zufluss reguliert. Dieses *feedback* repräsentiert die Substratabhängigkeit der Enzyme des Calvin-Zyklus.

Hinweise zur Bezeichnung der CO₂-pools

Für den intrazellulären CO₂-pool findet man häufig zwei verschiedene Bezeichnungen. Üblich sind c_i und p_i . Es gilt dabei

$$p_i = c_i \cdot P_{atm}. \quad (6.1)$$

Analog v. Willert *et al.* (1995) verwende auch ich diese beiden Bezeichnungen in dieser Arbeit. Die Namensgebung zeigt dabei an, ob man den Molenbruch c_i oder

¹Farquhar *et al.* (1980) spricht von „Dunkelatmung“, weil die damit verbundenen Prozesse kein Licht benötigen und sowohl am Tag als auch in der Nacht ablaufen.

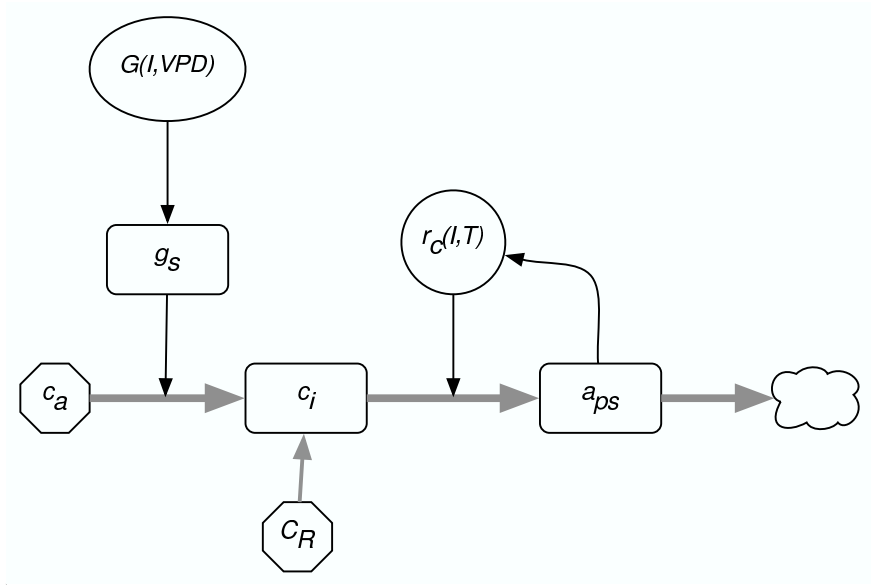


Abbildung 6.1: Das Modelldiagramm zeigt die Zusammenhänge im Skelettmodell. Kontrollierende Einflüsse sind als dünne schwarze Pfeile dargestellt, während der Fluss des Kohlenstoffs durch graue Pfeile repräsentiert wird.

den Partialdruck p_i verwendet. Für den CO_2 -Partialdruck der Umgebungsluft gelten dann die Bezeichnungen c_a oder p_a .

Ich möchte noch anmerken, dass die Wahl der Bezeichnung auch über die Einheit entscheidet, in der die CO_2 -pools dargestellt werden. Der Molenbruch c_i ist dimensionslos und wird häufig mit $\text{ppm} = \mu\text{l l}^{-1} = \mu\text{mol mol}^{-1} = \mu\text{Pa Pa}^{-1}$ angegeben. Der Partialdruck p_i hat die Einheit [Pa].

6.3 Die Regulation der Carboxylierungsrate

Die Carboxylierungsrate ist eine vom Licht und von der Temperatur abhängige Größe. Die Lichtabhängigkeit wird wieder mit einer Sättigungskurve nach der erweiterten Michelis-Menten Form (Thornley und Johnson, 1990) beschrieben. Analog zu Gleichung 5.3 definiert man:

$$\theta_c r^2 - r(\alpha_c I + V_{cmx}) + \alpha_c \theta_c I V_{cmx} = 0. \quad (6.2)$$

Es gilt wieder $\alpha_c > 0 \in \mathcal{R}$ und $\theta_c \in [0, 1]$. Lösen der Gleichung nach r und die Wahl der negativen Wurzel ergibt dann

$$r(I) = \frac{\alpha_c I + V_{cmx} - \sqrt{(\alpha_c I + V_{cmx})^2 - 4\alpha_c \theta_c^2 I V_{cmx}}}{2\theta_c}. \quad (6.3)$$

Dabei bezeichnet α_c wieder die Steigung der Kurve im ungesättigten Bereich und θ_c die Konvexität. V_{cmx} gibt die maximale Carboxylierungsrate wieder. Analog zu den Untersuchungen zur Lichtregulation der Blattleitfähigkeit wird auch für die Carboxylierungsrate eine Parametrisierung gesucht, so dass die Messwerte von dieser Sättigungskurve eingehüllt werden.

Leider liegen keine Messwerte zur Carboxylierungsrate vor, so dass ich in diesem Fall die normierten Lichtabhängigkeiten der Nettoassimilationsrate verwende. Bei diesem Ansatz steht im Vordergrund, dass die dynamischen Eigenschaften der Carboxylierungsrate die der Nettoassimilation bestimmen. Also sollte ein aus den Assimilationsraten abgeschätztes α_c und θ_c dem der Carboxylierungsrate entsprechen. Die maximale Carboxylierungsrate V_{cmx} muss später für die Simulationsläufe empirisch angepasst werden.

Tabelle 6.1: Ergebnisse der Parameterschätzung für die Parameter der Carboxylierungsrate aus den normierten Lichtabhängigkeitskurven.

Funktion	Parameter	Schätzwert	s^2
$r(I)$	α_c	0.01267	0.0025
	θ_c	0.965	0.0046

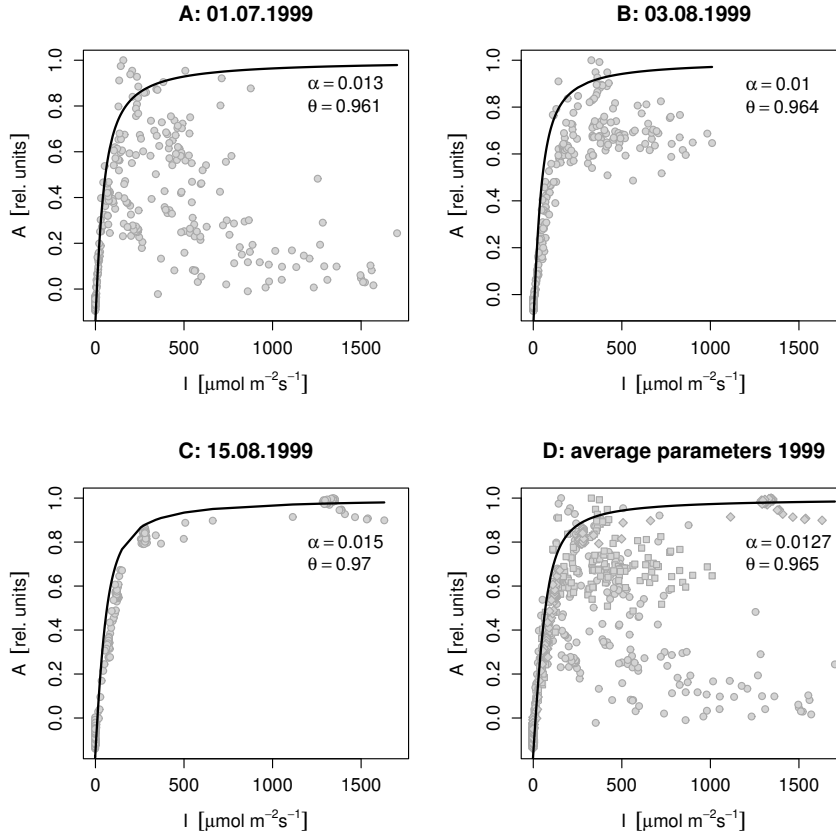


Abbildung 6.2: Parameterschätzung mittels Dosis-Effekt-Kurven zur Bestimmung der Parameter α_c und θ_c für die Abhängigkeit der Carboxylierungsrate vom Licht. Die Parameter wurden in A, B und C empirisch so gewählt, dass die normierten Messwerte der Assimilationsrate eingehüllt werden. In D ist das arithmetische Mittel der Parameter gegen alle Messdaten aufgetragen.

Die Abhängigkeit der Carboxylierungsrate von der Temperatur wird analog zu Farquhar *et al.* (1980) und Kirschbaum *et al.* (1998) mit einem Polynom dritten Grades beschrieben. Die Koeffizienten wurden dabei an die Messdaten der Eichen angepasst.

$$p(T) = 1 + 0.505t - 0.248 \cdot 10^{-3}t^2 - 8.09 \cdot 10^{-5}t^3 \text{ mit } t = T - 298.15 \text{ K} \quad (6.4)$$

Das Polynom ist dabei so skaliert, dass $p(T = 25^\circ\text{C}) = 1$ gilt. Damit ist $p(T)$

bei Temperaturen unterhalb von 25°C kleiner als Eins und bei Temperaturen oberhalb von 25°C größer als Eins.

Mit den beiden Gleichungen 6.3 und 6.4 kann man nun die Carboxylierungsrate folgendermassen darstellen:

$$r_c(I, T) = r(I)p(T). \quad (6.5)$$

Als letzten Regulationsfaktor beschreibe ich nun die *feedback*-Inhibition der Carboxylierungsrate durch den a_{ps} -pool. In der Arbeit von Giersch *et al.* (1990) über die Kontrolle und Regulation der photosynthetischen CO₂-Fixierung wird gezeigt, dass durch die Konservierung des Phosphatgehaltes oder die Verfügbarkeit von ATP keine optimalen Bedingungen für die Enzymreaktionen vorherrschen. So kann zum Beispiel die RuBP-Konzentration durch die Verfügbarkeit von Phosphat eingeschränkt sein. Eine solche Limitierung wird dann die Reaktion der Rubisco beeinflussen und damit auch die Carboxylierung. Die einfachste Möglichkeit, einen solchen Einfluss zu realisieren, ist die Formulierung einer linearen Abhängigkeit vom a_{ps} -pool².

$$f_c = 1 - \rho a_{ps} \quad (6.6)$$

Der Parameter ρ muss dabei so gewählt werden, dass $\rho a_{ps} < 1$ gilt.

6.4 Das Skelettmodell der Blattphotosynthese

Die Kombination des Modells der Blattleitfähigkeit in Gleichung 5.12 mit einem Ausdruck für die CO₂-Assimilation geschieht über den p_i -pool³. Wie schon angemerkt, werden zeitliche Änderungen in p_i über Quell- und Senkenterme realisiert. Bezüglich des Quellterms wird angenommen, dass die Blattleitfähigkeit g_s wie ein

²Vergleiche auch die Gleichungen 6.8 und 6.10

³In diesem Abschnitt wird immer die Partialdruckdarstellung für die CO₂-pools verwendet.

Ventil wirkt und den CO₂-Fluss in das Blatt hinein kontrolliert. Der Quellfluss $v_{c,in}$ ist dabei proportional der CO₂ Partialdruckdifferenz $(p_a - p_i)/P_{atm}$ (Lambers *et al.* 1998). Es gilt:

$$v_{c,in} = q \left(g_s \frac{p_a - p_i}{P_{atm}} + C_R \right) \quad (6.7)$$

Die Darstellung der Partialdruckdifferenz als Quotienten $(p_a/P_{atm}$ und p_i/P_{atm}) führt dazu, dass diese dimensionslos sind. Damit hat der erste Teil der Gleichung in der Klammer dieselbe Dimension wie g_s [mmol m⁻² s⁻¹]. Man kann C_R und andere relevante Raten, wie die Photosynthese etwa, ebenso in dieser Einheit ausdrücken. Nach Noe und Giersch (2004) dient der Faktor q dazu, den CO₂-Fluss [mmol m⁻² s⁻¹] in die korrespondierende Änderung der CO₂-Konzentration im Blatt [μmol ml⁻¹ s⁻¹ oder mM s⁻¹] umzurechnen.

Die Kombination der Gleichungen 6.5 und 6.6 mit dem Faktor q und dem CO₂-Partialdruck führen zur Gleichung des Verbrauchsterms

$$v_{c,out} = q r_c(I, T) f_c \frac{p_i}{P_{atm}}. \quad (6.8)$$

Damit ergibt sich die zeitliche Änderung des p_i -pools aus der Differenz zwischen dem Quell- und Senkenterm zu

$$\frac{dp_i}{dt} = v_{c,in} - v_{c,out} = q \left(g_s \frac{p_a - p_i}{P_{atm}} + C_R - r_c(I, T) f_c \frac{p_i}{P_{atm}} \right). \quad (6.9)$$

Die zeitliche Änderung des Assimilatpools a_{ps} wird durch die Carboxylierung $v_{c,out}$ (Gl. 6.8) und den Konsum der Intermediate durch den Metabolismus oder den Export aus dem Chloroplasten bestimmt. Die *sink*-Prozesse werden als proportional (Parameter w) zum a_{ps} -pool angenommen

$$\frac{da_{ps}}{dt} = q r_c(I, T) f_c \frac{p_i}{P_{atm}} - w a_{ps}. \quad (6.10)$$

Die Gleichungen 5.12, 6.9 und 6.10 bilden ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen für die drei Variablen g_s , p_i und a_{ps} . Zur besseren Übersicht ist

dieses System nachfolgend noch einmal dargestellt:

$$\frac{dg_s}{dt} = k_g(G(I, VPD) - g_s) \quad (6.11.a)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = q \left(g_s \frac{p_a - p_i}{P_{atm}} + C_R - r_c(I, T) f_c \frac{p_i}{P_{atm}} \right) \quad (6.11.b)$$

$$\frac{da_{ps}}{dt} = q r_c(I, T) f_c \frac{p_i}{P_{atm}} - wa_{ps}. \quad (6.11.c)$$

Löst man das dynamische System der Gleichungen 6.11.a-6.11.c für den stationären⁴ Fall, dann sollten die Gleichungen die übliche Beziehung zwischen A , g_s und p_i wiedergeben. Aus Gleichung 6.11.b erhält man in diesem Fall ($dp_i/dt = 0$)

$$0 = g_s \frac{p_a - p_i}{P_{atm}} + C_R - r_c(I, T) f_c \frac{p_i}{P_{atm}}. \quad (6.12)$$

Wie man weiter sieht, ist die Nettoassimilationsrate A in der üblichen Form (siehe Ball, (1987) und Katul *et al.* (2000)) gegeben. Man erhält

$$A = g_s \frac{p_a - p_i}{P_{atm}} + C_R, \quad (6.13)$$

oder, alternativ dazu

$$A = r_c(I, T) f_c \frac{p_i}{P_{atm}}. \quad (6.14)$$

Die beiden letzten Gleichungen 6.13 und 6.14 führen wieder auf das c_i -Dilemma zurück, welches schon in Kapitel 3 betrachtet wurde. Interessanterweise ist die im Kapitel 3 vorgestellte „empirische“ Lösung des c_i -Dilemmas in Form von Gleichung 3.21 in dem hier vorgestellten dynamischen Modell implizit enthalten. Das Skelettmodell erfüllt also für den stationären Fall (Gl. 6.12) direkt die Bedingung von Gleichung 3.21.

⁴alle Ableitungen werden zu Null

6.5 Ergebnisse

Die Simulationen mit dem Skelettmodell (Gl. 6.11.a-6.11.c) wurden wieder mit den Eingangsdaten aus den Jahren 1999 und 2000 durchgeführt. Die Parameter zum Lösen des Modells sind in Tabelle 6.2 und 6.3 dargestellt. Dabei wurden einige, schon beschriebene Parameter übernommen und andere durch Probieren an das Modell angepasst. Einige Parameter konnten zudem aus der Literatur entnommen und an das Skelettmodell angepasst werden. Speziell in den Arbeiten von Farquhar *et al.* (1980), Giersch *et al.* (1990) und Kirschbaum *et al.* (1998) findet man viele Parameterwerte, die erste Näherungen oder Ausgangspunkte beim Schätzen liefern können.

6.5.1 Vergleich zwischen experimentellen Daten und den Simulationsergebnissen

Die beiden Abbildungen 6.3 und 6.4 zeigen die Ergebnisse der Simulationen mit dem Skelettmodell für insgesamt fünf Eingangsdatensätze. In beiden Abbildungen zeigt die oberste Reihe diese Eingangsdaten. Wie schon im vorigen Kapitel beschrieben wurden auch hier wegen des Lösungsalgorithmus (CVODE⁵) nicht die Werte direkt verwendet, sondern die entsprechenden Splinefunktionen. In der zweiten Reihe findet man die Assimilationswerte, die nach Gleichung 6.13 berechnet wurden. Darunter in der dritten Reihe ist der intrazelluläre CO₂-Partialdruck abgebildet und in der vierten Reihe dann die Blattleitfähigkeit.

Betrachtet man die Assimilationsrate A in beiden Abbildungen (6.3-A2, B2, C2 und 6.4-A2, B2), so sieht man, dass in allen Fällen gute bis sehr gute Approximationen erzeugt werden. Die simulierten Flanken beim Sonnenaufgang am Morgen und beim Sonnenuntergang folgen fast exakt den beobachteten Zeitreihen. Zusätzlich kann man in Abb. 6.3-A2 sehen, dass selbst so „dramatische“

⁵vgl. auch Kap. 9.1 im Anhang.

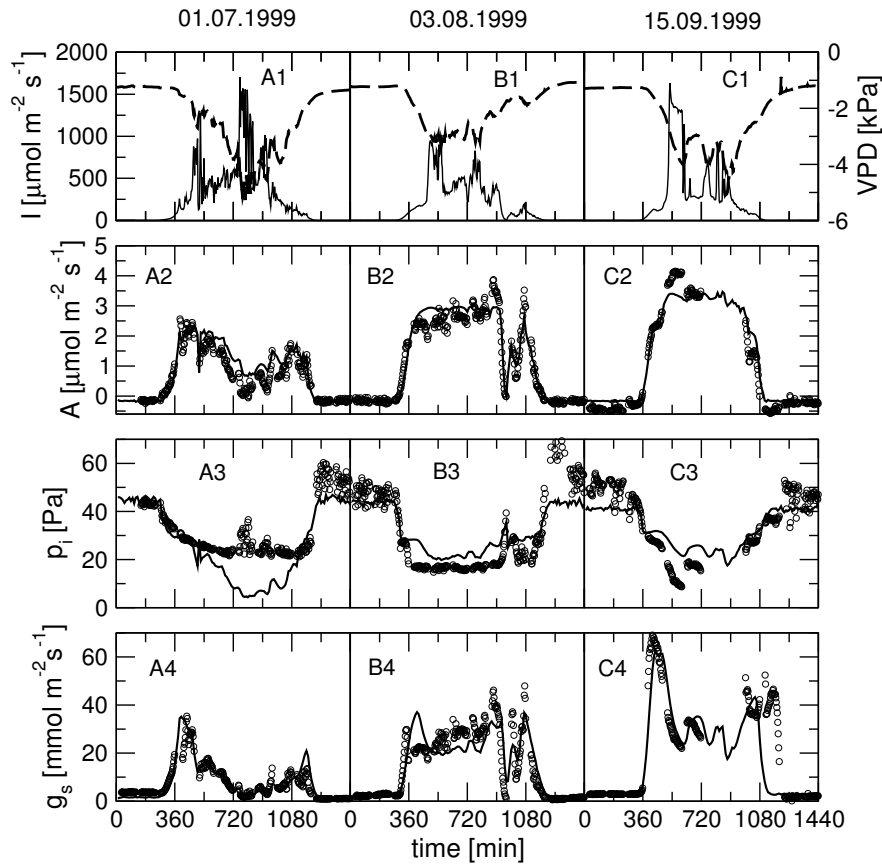


Abbildung 6.3: Vergleich zwischen dem Skelettmodell (–) und der Messung (o) an *Q. robur* für das Jahr 1999; die einzelnen Tage sind in Spalten angeordnet. In der obersten Reihe sind die Eingangsdaten für Licht (durchgezogene Linie) und für *VPD* (getrichelt) dargestellt. Es folgen dann weiter von oben nach unten die Assimilationsrate A entsprechend Gleichung 6.13, der intrazelluläre CO_2 -Partialdruck p_i und die Blattleitfähigkeit g_s . Als Startwerte für die Variablen wurde $a_{ps} = 1.06 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$, $p_i = 45 \text{ Pa}$ und $g_s = 0.55 \text{ mmol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ gesetzt.

Ereignisse wie ein Gewitter am 03.08.1999, um etwa 16:00 Uhr (960 min), problemlos simuliert werden. Während des Gewitters sank der Lichtfluss innerhalb kurzer Zeit um fast $500 \mu\text{mol Quanten m}^{-2} \text{s}^{-1}$ auf Werte unterhalb von $10 \mu\text{mol Quanten m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ab, was zu einer sehr steilen Flanke in der Assimilationsrate führte. In einigen Fällen überschätzt das Modell die Messdaten ein wenig. Dies sieht man in Abb. 6.3-B2 und nochmals in Abb. 6.4-A2 und B2.

Die modellierten Zeitreihen von p_i (Abb. 6.3 und 6.4, dritte Reihe) zeigen in den meisten Fällen einen akzeptablen Fit der Messwerte. Eine Ausnahme bildet Abb. 6.3-A3, bei der im Tagesverlauf eine signifikante Unterschätzung der Messwerte beobachtet werden kann. In allen anderen Fällen bleibt am Tag der simulierte Wert etwas über dem gemessenen. Eine weitere Ausnahme ist in Abb. 6.3-B3 am Abend zu sehen. Während bei den anderen Zeitreihen, die simulierten Werte während der Nacht recht gut zu den Messdaten passen, werden sie hier sehr stark unterschätzt. Allerdings sind an diesem Tag die gemessenen Werte sehr viel höher als in allen anderen Fällen.

Bei den Versuchen, bessere Approximationen der Messdaten zu finden, wurden die Parameter V_{cmx} , α_c und θ_c in Gleichung 6.3 variiert. Dabei stellte sich heraus, dass das Modell zwei „Grenzzustände“ hat. Bei dem einen ist es möglich, einen akzeptablen Fit für A zu erreichen, aber auf Kosten einer schlechteren Übereinstimmung von p_i . Beim anderen „Zustand“ ist dagegen der Fit von p_i im akzeptablen Rahmen, jedoch ist nun A schlecht repräsentiert. Wenn man beachtet, dass p_i am Tag nahezu konstante Werte um 20 Pa annimmt, ist dieses Verhalten des Modells ein Hinweis darauf, dass dem Modell ein unbekannter physiologischer Mechanismus fehlt, der am Tag eine begrenzte Homöostase von p_i im Blatt unterstützt.

Wie schon in Kapitel 5 zu sehen, zeigen die simulierten Werte der Blattleitfähigkeit (Abb. 6.3 und 6.4, unterste Reihe) sehr gute Übereinstimmungen mit den Messdaten. Die Flanken am Morgen und am Abend werden gut angenähert. Ebenso der Einbruch der Blattleitfähigkeit beim Gewitter (Abb. 6.3-B4). Am schlechtesten stimmen die modellierten Werte in Abb. 6.3-C4 mit den Messdaten überein. Hier fällt die simulierte Blattleitfähigkeit schon deutlich früher ab als die gemessene. Allerdings ist anzunehmen, dass die Messdaten in diesem Zeitabschnitt fehlerhaft sind. Während um ca. 18:00 Uhr (1080 min) die Sonne untergegangen ist, wie man unschwer in Abb. 6.3-C1 sieht, folgt der Abfall der gemessenen Blattleitfähigkeit erst mit dem sehr unwahrscheinlichen Abstand von

2 Stunden um 20:00 Uhr (1200 min). Es ist anzunehmen, dass die Modellantwort den richtigen Verlauf wiedergibt.

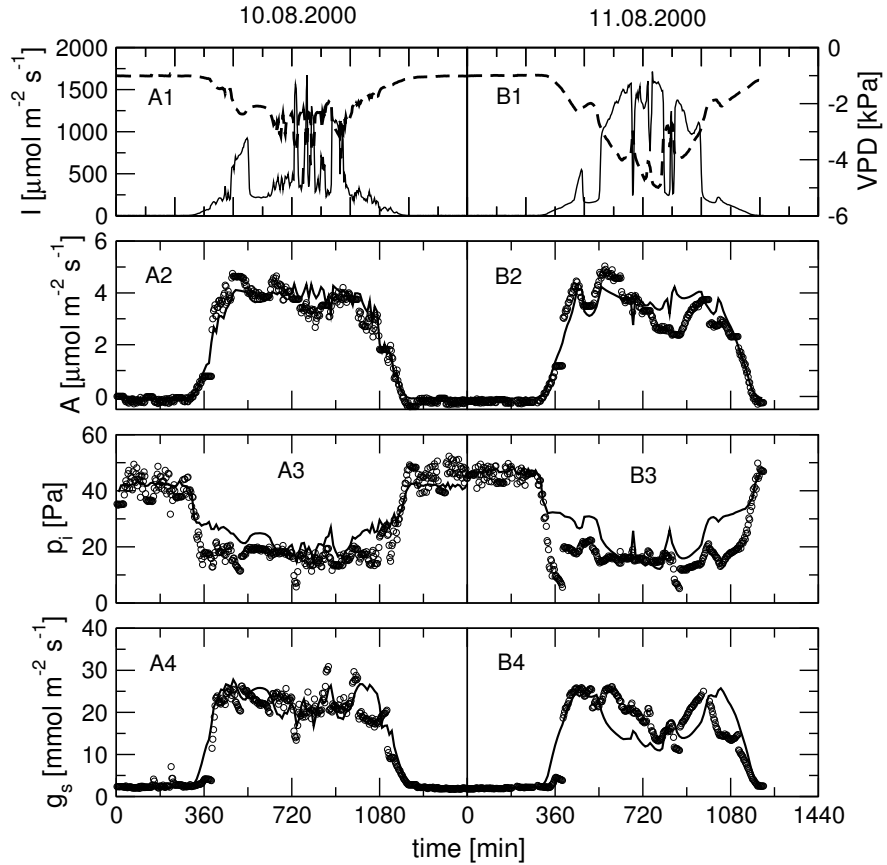


Abbildung 6.4: Vergleich zwischen dem Skelettmodell (–) und der Messung (o) an *Q. robur* für das Jahr 2000. Die Darstellung entspricht der von Abb. 6.3. Die Startwerte für die Variablen wurden mit $a_{ps} = 1.06 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$, $p_i = 45 \text{ Pa}$ und $g_s = 0.55 \text{ mmol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ initialisiert.

Tabelle 6.2: Variable Parameter des Skelettmodells. Diese wurden verwendet, um das Modell an die Daten für A , g_s und p_i anzupassen. Die Parameter G_{MAX} und V_{cmx} wurden zunächst mit Hilfe eines Parameterschätzverfahrens (Marquardt-Algorithmus, Marquardt (1963)) lokalisiert und anschliessend, wie der Parameter N durch Probieren abgeschätzt.

Parameter	1999			2000		Einheit
	01.07.	03.08.	15.09.	10.08.	11.08.	
G_{MAX}	50	45	90	30	32	$\text{mmol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
N	2.2	1.4	1.4	1.0	1.0	–
V_{cmx}	18	26	28	32	34	$\mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$

6.6 Diskussion

Das Skelettmodell ist, trotz seiner einfachen Struktur, in der Lage, die gemessenen Tagesverläufe von Gaswechseldaten zu reproduzieren. Dabei erreichen die simulierten Tagesgänge eine gute bis befriedigende Übereinstimmung mit den gemessenen Daten für A , p_i und g_s . In dieser Form, ist das Modell also ausreichend, um die physiologischen Prozesse zu beschreiben. Es basiert auf drei essentiellen Annahmen.

1. Die Umweltfaktoren Licht und VPD wirken unabhängig voneinander auf die Regulation der Blattleitfähigkeit ein.
2. Es ist möglich, die aktuelle Blattleitfähigkeit als Minimum dieser Faktoren darzustellen. Mit dieser simplen Funktion kann man die Messdaten genau genug beschreiben. Wie der Vergleich zwischen dem Produktansatz und dem Minimumansatz im letzten Kapitel zeigt, sind die Ergebnisse für den Minimumansatz besser. Wenn man das Modell weiter ausbaut, sind an dieser Stelle eventuell Änderungen notwendig. So ist schon in den vorliegenden

Messdaten sichtbar, dass sich die maximale Blattleitfähigkeit G_{MAX} über den Tag verändert (gegen Abend werden geringere Werte erreicht). Snaith und Mansfield (1985, 1986) haben einen circadianen Rhythmus für die Öffnung der Stomata beschrieben, bei dem die Phasen des Rhythmus den Ein- und Ausstrom von Ionen in den Schließzellen beeinflussen. Eine Variation der Blattleitfähigkeit über den Verlauf der Vegetationsperiode ist ebenso wahrscheinlich.

3. Der Kohlenstofffluss wird nur von der Blattleitfähigkeit und der Carboxylierungsrate kontrolliert. Für die Carboxylierungsreaktion selbst wird angenommen, dass diese das vorhandene CO_2 im p_i -pool nutzt. Dabei ist sie natürlich vom aktuellen Lichtfluss und der Temperatur abhängig und wird vom Zustand der Intermediate des Calvin-Zyklus beeinflusst.

Die Ergebnisse zeigen, dass die Struktur des Modells die Dynamik der Photosynthese im Tagesverlauf wiedergibt. Dabei ist diese Modellstruktur den Modellen von Gross *et al.* (1991), Pearcy *et al.* (1997) und Kirschbaum *et al.* (1998) insofern überlegen, weil es keine Forderung an den intrazellulären CO_2 -pool gibt und dieser dynamisch bestimmt wird. Wie in Noe (2000) ausgeführt ist, sind die vorgenannten Modelle der Klasse der DAE-Systeme⁶ zuzuordnen und unterliegen dadurch bestimmten Einschränkungen, etwa was die Struktur der Eingangsdaten betrifft.

Schwächen zeigt das Skelettmodell nur bei der Vorhersage von p_i . Allerdings betrachtet das Modell einige Elemente wie die Atmung oder die Lichtsättigung der Assimilation in einer sehr einfachen Weise. Es wurden einige Versuche unternommen, eine lichtgesättigte Photosynthese und eine, durch die Rubisco Aktivität limitierte RuBP-Regenerierung (Farquhar *et al.*, 1980) in das Skelettmodell zu integrieren. Allerdings erhöhte dies nur die Komplexität und führte bei der einfachen Struktur, speziell des a_{ps} -pools als Repräsentation des Calvin-Zyklus,

⁶vom englischen *differential algebraic equation*.

zu keinem besseren Fit der Daten. Des weiteren macht eine solche Regulation auf der Ebene der Intermediate des Calvin-Zyklus erst dann Sinn, wenn diese auch im Modell enthalten sind. Daher ist es speziell im Hinblick auf die Möglichkeit, mit dem Modell die nichtlineare Dynamik der Blattphotosynthese zu untersuchen sinnvoll, den möglichst einfachen Ansatz zu verwenden.

Ein überraschendes Ergebnis des Skelettmodells ist es, dass es mit nur drei variablen Parametern (Tab. 6.2) möglich ist, einen so guten Fit der Messdaten zu erreichen. Die Parameter G_{MAX} und N beeinflussen die Blattleitfähigkeit und V_{cmx} ist ein Schlüsselparameter der Carboxylierungsrate. Wie man in Tabelle 6.2 sieht, steigt im Jahre 1999 der Parameter G_{MAX} vom $50 \text{ mmol m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ im Juli auf $90 \text{ mmol m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ im September an. Gleichzeitig nimmt aber der Einfluss von VPD auf die Blattleitfähigkeit (Parameter N) von 2.2 auf 1.4 ab. Für ein normales, mitteleuropäisches Klima ist es wahrscheinlich, dass im Sommer das Wasserdampfdruckdefizit höher ist als im Herbst. Die Pflanze reagiert auf hohe VPD -Werte damit, dass die maximal mögliche Blattleitfähigkeit erniedrigt wird und so der Wasserverlust geringer gehalten werden kann. Gleichzeitig erhöht die Pflanze aber auch die Sensitivität der Blattleitfähigkeit gegenüber dem Dampfdruckdefizit. Im umgekehrten Fall, wenn geringere VPD -Werte auftreten, kann die Blattleitfähigkeit erhöht werden und die Sensitivität gegenüber VPD nimmt ab.

Betrachtet man nun den dritten Parameter, V_{cmx} , so stellt man fest, dass dieser über die Messperiode vom Juli bis September im Jahr 1999 ansteigt. Dies bedeutet, dass die Photosynthese im Herbst effizienter arbeitet als im Sommer. Ein solches Verhalten macht für normales, mitteleuropäisches Klima ebenfalls Sinn. Da es gewöhnlich im Herbst feuchter und kühler als im Sommer ist, wird es im Herbst einfacher, Kohlenstoff aufzunehmen ohne zuviel Wasser zu verlieren. Leider ist es nicht möglich, die beiden Jahre 1999 und 2000 miteinander zu vergleichen, weil im Jahr 2000 nur Daten für zwei aufeinanderfolgende Tage vorliegen.

Es reicht also aus, wenn man diese drei Parameter betrachtet, um die Variation in den Daten zu beschreiben. Man kann zeigen, dass es möglich ist, mit den fünf Parametertripeln (G_{MAX}, N, V_{cmx}) aus Tabelle 6.2 eine zwei-dimensionale Ebene im Parameterraum aufzuspannen. Sollte man bei Untersuchungen mit weiteren Daten in der Zukunft auf dasselbe Ergebnis kommen, so sind die drei Parameter G_{MAX} , N und V_{cmx} nicht voneinander unabhängig und es reichen zwei Parameter zur Beschreibung der saisonalen Variation aus.

Tabelle 6.3: Konstante Parameter des Skelettmodells. Diese Parameter werden bei Simulationen mit verschiedenen Eingangsdaten nicht variiert. Der Skalierungsfaktor δ wurde aus den Eingangsdaten abgeschätzt, so dass γ' (Gl. 5.5) auf das Intervall $[0, 1]$ beschränkt wird. Die Parameter für die lichtabhängige Blattleitfähigkeit (α , θ , g_{max} , g_{min}) wurden aus Kirschbaum *et al.* (1998) entnommen und an die Messdaten für Eichen angepasst.

Parameter	Wert	Einheit
p_a	36.0	Pa
P_{atm}	101.3	kPa
k_g	0.11	min^{-1}
w	0.38	min^{-1}
q	24.9	$\text{kPa m}^2 \text{mmol}^{-1}$
δ	1.8	kPa
α	6.4	$\text{mol (mol Quanten)}^{-1}$
θ	0.9	–
g_{max}	1.0	$\text{mmol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
g_{min}	0.04	$\text{mmol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
α_c	0.13	$\text{mol (mol Quanten)}^{-1}$
θ_c	0.965	–
C_R	2.0	$\text{mmol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
ρ	400	μM^{-1}

Kapitel 7

Erweiterung des Modells mit Calvin-Zyklus Intermediaten

7.1 Einleitung

Die Erweiterung des Skelettmodells aus dem vorherigen Kapitel um einige Schlüsselintermediate des Calvin-Zyklus folgt im wesentlichen zwei Vorgaben, die das Modell der Blattphotosynthese als Teil einer prozessorientierten Simulation der Isoprenemission erfüllen muss. Zum einen hängt die Isoprensynthese von der Verfügbarkeit an Triosephosphaten (Logan *et al.*, 1999; Zimmer *et al.*, 2000) ab, welche über die photosynthetische CO₂-Fixierung bereitgestellt werden und zum anderen von der Verfügbarkeit von ATP und NADPH.

Die biochemische CO₂-Fixierung wird häufig mit dem Modell von Farquhar *et al.* (1990) realisiert. Giersch *et al.* (1990) hat eine Variante dieses Modells vorgestellt, das zudem eine Beschreibung des Phosphattranslokators enthält und somit die Triosephosphate detailliert beschreibt. Die Anbindung an das Modell der Blattleitfähigkeit mit dem interzellularen CO₂-pool wird über eine Carboxylierungsrate W_c realisiert. Der vorliegende Ansatz hierzu wurde nach Kirschbaum *et al.* (1998) modifiziert und an die Messdaten angepasst. Der Ansatz von Giersch

et al. (1990) wird noch um zwei *pools* erweitert, die den NADP- und NADPH-Gehalt aus der Elektronentransportrate bestimmen.

7.2 Modellerweiterung

7.2.1 Lichtabhängige Regulation der CO₂-Fixierung

In Anlehnung an Farquhar *et al.* (1980) und Giersch *et al.* (1990) werden die Elektronentransportrate J , die Carboxylierungsrate V_{car} und der Aktivierungszustand der Rubisco W_c als lichtabhängige Größen bestimmt. V_{car} und W_c werden wie in Kirschbaum *et al.* (1998) berechnet und sind neben dem Licht noch von der CO₂- und O₂-Konzentration im Blatt abhängig.

Die Elektronentransportrate J wird wieder über die erweiterte Michaleis-Menten Form nach Thornley und Johnson (1990) bestimmt und es gilt:

$$\theta_J J^2 - J(\alpha_J I + J_{max}) + \alpha_J \theta_J I J_{max} = 0. \quad (7.1)$$

Mit $\alpha_J > 0 \in \mathcal{R}$ und $\theta_J \in [0, 1]$ gilt dann für die lichtabhängige Elektronentransportrate $J(I)$:

$$J(I) = \frac{\alpha_J I + J_{max} - \sqrt{(\alpha_J I + J_{max})^2 - 4\alpha_J \theta_J^2 I J_{max}}}{2\theta_J}. \quad (7.2)$$

Zur Bestimmung des Aktivierungszustandes der Rubisco wird zunächst die ebenfalls lichtabhängige Carboxylierungsrate $V_{car}(I)$ analog zu Gleichung 5.4 bestimmt und es gilt:

$$V_{car}(I) = V_{c0} - \frac{\alpha_R I + (V_{cmx} - V_{c0}) - \sqrt{(\alpha_R I + (V_{cmx} - V_{c0}))^2 - 4\alpha_R \theta_R^2 I (V_{cmx} - V_{c0})}}{2\theta_R}. \quad (7.3)$$

Es gilt wieder $\alpha_R > 0 \in \mathcal{R}$ und $\theta_R \in [0, 1]$ und V_{cmx} ist die maximale Carboxylierungsrate während V_{c0} die minimale Carboxylierungsrate darstellt. Die

Aktivierung der Rubisco lässt sich mit dieser Carboxylierungsrate nun wie folgt bestimmen:

$$W_c = \frac{V_{car}c_i^2}{(c_i + k_a)(c_i + k_m)}. \quad (7.4)$$

Dabei ist W_c sowohl vom Licht (V_{car}) als auch vom intrazellulären CO_2 -Partialdruck (c_i) abhängig. Über die Michaelis-Menten Konstanten k_a (Aktivierung der Rubisco durch CO_2) und k_m (CO_2/O_2 Verhältnis) geht dann noch die Abhängigkeit des aktuellen Aktivierungszustandes und des Carboxylierungs-/Oxygenierungsverhältnisses der Rubisco ein. Für k_m gilt zudem die folgende Gleichung:

$$k_m = k_c \left(1 + \frac{o_i}{k_o}\right). \quad (7.5)$$

k_c ist die katalytische Michaelis-Menten Konstante der Rubisco bezüglich dem CO_2 -Partialdruck (c_i) und entsprechend ist k_o die katalytische Konstante bezüglich dem O_2 -Partialdruck (o_i). Sowohl k_c als auch k_o sind zudem von der Temperatur abhängig (Lambers *et al.*, 1998), worauf im weiteren Verlauf nicht näher eingegangen wird.

7.2.2 Metabolite des erweiterten Modells

Die Metabolite des erweiterten Modells entsprechen im wesentlichen denen, die in Giersch *et al.* (1990) beschrieben werden. Dies sind RuBP, PGA, TP, Ru5P, P_i , ATP und ADP. Als zusätzliche Metabolite werden im erweiterten Modell noch NADP und NADPH betrachtet.

Die Einschränkungen und Annahmen für das Modell, wie sie in Giersch *et al.* (1990) beschrieben sind bleiben gültig und so nehme ich ebenfalls an, dass $A_0 = \text{ATP} + \text{ADP} = \text{const.}$ und, dass der Gesamtphosphatgehalt P_0 konserviert ist. Dann definiert sich der Gesamtgehalt an RuBP zu

$$\text{RuBP}_t = \frac{P_0 - (\text{PGA} + \text{TP} + P_i + \text{Ru5P} + \text{ATP})}{2} \quad (7.6)$$

und kann in Abhängigkeit von der Phosphatkonzentration und der Konzentration der anderen Metabolite ausgedrückt werden. Da zur CO_2 -Fixierung ein *Rubisco*·*RuBP*-Komplex gebildet wird, bestimmt sich der Anteil an freiem RuBP zu

$$RuBP_f = RuBP_t - Rubisco \cdot RuBP \quad (7.7)$$

und damit kann der *Rubisco*·*RuBP*-Komplex als Funktion der freien und totalen RuBP-Konzentration ausgedrückt werden. Nun kann man die Ratengleichung v_1 für die CO_2 -Fixierung aufstellen.

$$v_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{W_c RuBP_t}{RuBP_t + k_r} \right) \quad (7.8)$$

W_c wird wie in Gleichung 7.4 berechnet und korrespondiert mit dem Ansatz in Kirschbaum *et al.* (1998). k_r ist die Michaelis-Menten-Konstante bezüglich RuBP. In dieser Form ist die Gleichung 7.8 wie in Farquhar *et al.* (1980) gegeben.

Analog zu Giersch *et al.* (1990) wird nun die PGA-Reduktion als reversible Reaktion wie folgt modelliert.

$$v_2 = \frac{V_{m2} \left(PGA \cdot ATP - ADP \cdot TP \frac{P_i}{k_e} \right)}{k_{m21} + PGA \cdot ATP \frac{k_{m21}}{k_{m22}} + ADP \cdot TP \frac{P_i}{k_e}} \quad (7.9)$$

V_{m2} , k_{m21} und k_{m22} sind die kinetischen Parameter der Phosphoglyceratkinase (PGK) und k_e ist die apparente Gleichgewichtskonstante der kombinierten Reduktionsreaktion durch die PGK und GAPD¹. Die Abhängigkeit von NADP in dieser Reaktion wird nicht explizit beschrieben sondern in der vorliegenden Fassung über die genannte Gleichgewichtskonstante k_e eingebracht. Daher taucht in dieser Gleichung NADP und NADPH nicht als Term auf.

Im nächsten Schritt werden die Triosephosphate (TP) weiter reduziert. Diese

¹Glycerinaldehydphosphat-Dehydrogenase, dieses Enzym katalysiert in Abhängigkeit von NADP den eigentlichen Reduktionsschritt zum Triosephosphat.

Reaktion wird als zusammengefasster und irreversibler² Reaktionsschritt modelliert.

$$v_3 = \frac{V_{m3} TP}{TP + k_{m3}} \quad (7.10)$$

Im letzten modellierten Regenerationsschritt entsteht nun wieder aus Ru5P über eine Phosphorylierung der CO₂-Akzeptor RuBP.

$$v_4 = \frac{V_{m4} \cdot Ru5P \cdot ATP}{k_{m41}k_{m42} + k_{m42}ATP + k_{m43}P_i + Ru5P \cdot ATP} \quad (7.11)$$

Der überwiegende Teil (Sitte *et al.*, 1993) der Photosyntheseprodukte verlässt den Chloroplasten und wird dem Stoffwechsel zugeführt. Im Modell wird dies durch eine Ratengleichung für den Phosphattranslokator in der Chloroplastenmembran realisiert.

$$v_5 = \frac{V_{m5} \cdot \left(\frac{P_i^c}{k_{m55}} TP - P_i \frac{TP^c}{k_{m53}} \right)}{\frac{P_i^c}{k_{m55}} + \frac{TP^c}{k_{m53}} + P_i + TP + \left(\frac{P_i^c}{k_{m55}} + \frac{TP^c}{k_{m53}} \right) (P_i + TP)} \quad (7.12)$$

Der Superskript „c“ in Gleichung 7.12 bezeichnet die im Cytoplasma lokalisierten Konzentrationen für Phosphat und Triosphosphat. Im Blattphotosynthesemodell werden P_i^c und TP^c als konstante Werte gewählt, da kein Verbraucher definiert ist. Wird das Modell als Modul an ein Ioprensynthesemodell gekoppelt, so müssen diese beiden Metabolite jedoch als Variablen realisiert werden.

Die Photophosphorylierungsreaktion ist wie folgt beschrieben:

$$v_6 = 0.66 \cdot \frac{J(I) ADP}{ADP + k_{m61}} \cdot \frac{P_i}{P_i + k_{m62}}. \quad (7.13)$$

Der Proportionalitätsfaktor 0.66 bestimmt, nach Giersch *et al.* (1990), die „Anzahl“ an Molekülen ATP, die durch die Übertragung von einem Elektron entstehen.

²In dieser zusammengefassten Reaktion treten insbesondere bei den via Phosphatasen (FBPase, SBPase) katalysierten Reaktionen irreversible Schritte auf.

Die Bildung von NADPH wird über einen empirischen Proportionalitätsfaktor κ an die Elektronentransportrate $J(I)$ gekoppelt. Der Aufbau eines NADPH-*pools* wird über die kinetischen Parameter V_{m7} und k_{m7} gesteuert.

$$v_7 = \kappa J(I) \cdot \frac{V_{m7} \text{ NADP}}{\text{NADP} + k_{m7}} \quad (7.14)$$

Unter Verwendung der Ratengleichungen 7.8 - 7.13 kann nun das erweiterte Modell der biochemischen CO₂-Fixierung formuliert werden.

$$\frac{dRuBP_f}{dt} = -v_1 + v_4 \quad (7.15.a)$$

$$\frac{dPGA}{dt} = 2v_1 - v_2 \quad (7.15.b)$$

$$\frac{dTP}{dt} = v_2 - 5v_3 - v_5 \quad (7.15.c)$$

$$\frac{dRu5P}{dt} = 3v_3 - v_4 \quad (7.15.d)$$

$$\frac{dP_i}{dt} = v_2 + 2v_3 + v_5 - v_6 \quad (7.15.e)$$

$$\frac{dATP}{dt} = -v_2 - v_4 + v_6 \quad (7.15.f)$$

$$\frac{dADP}{dt} = v_2 + v_4 - v_6 \quad (7.15.g)$$

In der obigen Form entspricht das Modell dem Ansatz in Giersch *et al.* (1990) wobei die Anbindung an den c_i -*pool* in Anlehnung an Kirschbaum *et al.* (1998) verändert wurde. Zur Berechnung der NADP/NADPH-*pools* wird die Ratengleichung v_7 verwendet, die in dieser Form nicht regulativ auf das Modell des Calvin-Zyklus einwirkt.

$$\frac{dNADPH}{dt} = v_7 - \lambda v_2 \quad (7.16.a)$$

$$\frac{dNADP}{dt} = -v_7 + \lambda v_2 \quad (7.16.b)$$

Analog zu ATP und ADP wird angenommen, dass $N_0 = \text{NADP} + \text{NADPH}$ gilt. Über diese beiden Gleichungen ist es möglich, einen NADPH-*pool* für die Anbin-

dung des Blattphotosynthesemodells an ein Isoprensythesemodell bereitzustellen. Dieser hängt von der Elektronentransportrate J und der PGA-Reduktion (v_2) ab, beeinflusst diese aber nicht selbst. Wird das erweiterte Blattphotosynthesemodell in Verbindung mit einem Isoprensythesemodell verwendet, so ist ein weiterer NADPH verbrauchender Term notwendig.

Mit den Gleichungen 7.15.a - 7.15.g, 7.16.a und 7.16.b kann man nun das Skelettmodell (Gleichungen 6.11.a - 6.11.c) erweitern. Dazu ersetzt man die Carboxylierungsrate $r(I, T)$ (Gl. 6.5) durch v_1 und es fällt der a_{ps} -pool (Gl. 6.11.c) weg.

7.3 Ergebnisse

Das erweiterte Modell wurde mit den Eingangsdaten für Licht, Temperatur und Luftfeuchte vom 10.08.2000 berechnet. Die Parameter sind in Tabelle 7.2 auf Seite 95 zusammengefasst und die Startwerte der Variablen sind in Tabelle 7.1 auf Seite 92 aufgeführt.

Leider liegen nur sehr wenige Messdaten pro Tag für die Metabolitgehalte vor. Es wurde zu verschiedenen Zeitpunkten während der Messperiode tagsüber Proben genommen (vgl. Bauknecht, 2001), diese ergeben aber pro Tag nur etwa 4-5 Messpunkte. Daher können diese gemessenen Werte nur als Hinweise verwendet werden, in welchen Konzentrationsbereichen die Metabolitgehalte am Tag zu liegen kommen.

Die modellierten Tagesgänge des freien und gesamten RuBP-Gehaltes (Abb. 7.1) zeigen einen starken Abfall der Konzentration am Morgen. Die Konzentration des RuBP-Gesamtgehaltes sinkt von ca. 6.5 mM auf etwa 1 mM (min. 0.6 mM) und stagniert dort über den Tag, um abends dann wieder auf den „Nachtwert“ von etwa 6.5 mM anzusteigen. Die Konzentration des freien RuBP ist entsprechend geringer und schwankt zwischen 0.7 mM und 0.07 mM. Da RuBP den CO₂-Akzeptor darstellt, ist die Verfügbarkeit des Akzeptors der limitierende Faktor

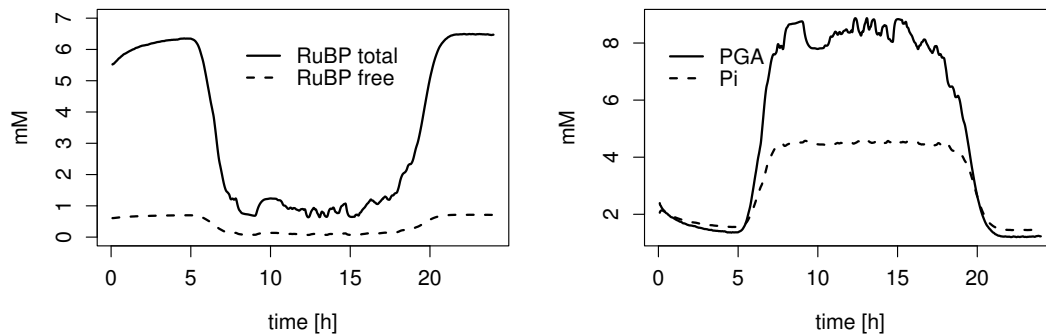


Abbildung 7.1: Modellierter Tagesgänge von RuBP (linkes Diagramm) und PGA sowie P_i (rechtes Diagramm).

der CO_2 -Fixierung.

Im gleichen Zuge wie der RuBP-Gehalt absinkt, steigt der PGA-Gehalt (Abb. 7.1) als „Carboxylierungsprodukt“ an. Es werden maximale Werte um 8,8 mM erreicht, während die minimalen Konzentrationen bei 1,2 mM liegen. Ebenso steigen die Triosephosphatgehalte (Abb. 7.2) an und erreichen Werte zwischen 0,17 mM und 1,15 mM. Mit einem Ansteigen der Konzentration an Triosephosphaten im Chloroplasten geht nun eine erhöhte Austauschrate (TP gegen P_i) des Phosphattranslokators einher und somit steigt auch der P_i -Gehalt im Chloroplasten an (Abb. 7.1).

Neben dem Export ins Cytoplasma werden die Triosephosphate zur Regeneration des CO_2 -Akzeptors zunächst in Ru5P umgewandelt. Wie in Abb. 7.2 zu sehen ist, steigt der Ru5P-Gehalt analog dem TP-Gehalt an. Es werden Werte zwischen 0,09 mM und 0,175 mM erreicht. Man sieht in dieser Abbildung aber auch, dass der weitaus größere Teil an Triosephosphaten exportiert wird.

Die Photophosphorylierungsreaktion führt zu einem raschen Anstieg der ATP-Konzentration, wenn am Morgen der Lichtfluss ansteigt und zu einem raschen Abfall am Abend (Abb. 7.2). Vergleicht man den Verlauf der ATP-Konzentration mit dem der P_i -Konzentration (Abb. 7.1), so stellt man fest, dass das Modell kei-

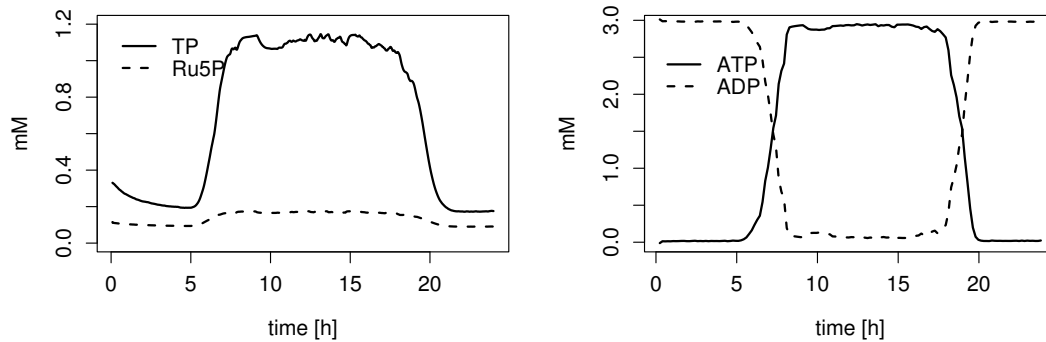


Abbildung 7.2: Modellierter Tagesgänge von Triosephosphaten (TP), Ru5P (linkes Diagramm) und ATP sowie ADP (rechtes Diagramm).

ne Phosphatlimitierung beinhaltet. Es gilt wegen der Konservierung der totalen Phosphatkonzentration (Gleichung 7.6) die Beziehung $P_0 > A_0$. Der ATP-Gehalt wird somit wesentlich von der ADP-Verfügbarkeit und dem Licht bestimmt.

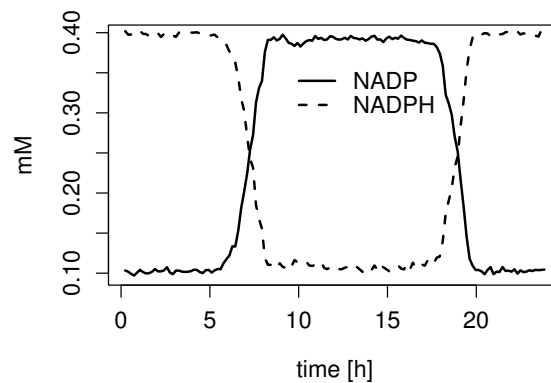


Abbildung 7.3: Modellierter Tagesgänge von NADP und NADPH.

Vergleicht man die beiden Ratengleichungen v_6 und v_7 (7.13 und 7.14), so fällt auf, dass beide recht ähnlich aufgebaut sind. Allerdings fehlt bei v_7 die Abhängigkeit vom Phosphat. Es wundert daher nicht, dass die Verläufe der NADP- und NADPH-Gehalte denen von ATP/ADP ähneln, allerdings unterscheiden sich die

Wertebereiche um einen Faktor von 10.

Tabelle 7.1: Initialwerte für die Variablen des erweiterten Modells. Die Werte wurden entweder aus Giersch *et al.* (1990) übernommen oder sind aus Daten über Metabolitgehalte (Bauknecht, 2001; Lawlor, 1990) abgeschätzt.

Variable	Initialwert	Einheit
A_0	3.0	mM
N_0	0.5	mM
P_0	16.0	mM
$RuBP_0$	3.0	mM
PGA_0	2.8	mM
TP_0	0.5	mM
$Ru5P_0$	0.2	mM
$P_{i0} = P_i^c$	1.4	mM
ATP_0	0.5	mM
$ADP_0 = A_0 - ATP_0$	2.5	mM

7.4 Diskussion

Als wesentlichen Schritt bei der Modellerweiterung ist der Ersatz der Carboxylierungsrate $r(I, T)$ durch die Ratengleichung v_1 zu nennen. Mit diesem Schritt wird der etwas vereinfachte Ansatz des Skelettmodells durch den von Farquhar *et al.* (1990) entwickelten und von Giersch *et al.* (1990), Gross *et al.* (1991) und Kirschbaum *et al.* (1998) verwendeten und weiterentwickelten ausgetauscht. Der Hauptvorteil bei diesem erweiterten Ansatz ist die Einbeziehung der Rubisco in die CO₂-Fixierung. Damit erhält man die CO₂-limitierte Carboxylierungsrate W_c .

Da, durch die modellierten Metabolite, die Regeneration von RuBP beschrieben ist, ist im erweiterten Modell eine Rückkopplung auf die CO₂-Fixierung

enthalten. Ausserdem ist damit auch die RuBP-limitierte Carboxylierungsrate beschrieben. Der modellierte Teil des Calvin-Zyklus ersetzt somit die Rückkopplungsgleichung 6.6 des Skelettmodells.

Gemessen an der Assimilationsrate A , der Blattleitfähigkeit g_s und dem intrazellulären CO_2 -pool c_i , bringt die Modellerweiterung keinen wesentlichen Vorteil gegenüber dem Skelettmodell. Allerdings ist die Konzentration der Triosephosphate, die dem Metabolismus zugeführt werden, beim erweiterten Modell genauer einstellbar. Im Skelettmodell kann hier nur ein prozentualer Anteil des a_{ps} -pools verwendet werden. Diese Genauigkeit ist im Zusammenhang mit einem Isoprenemissionsmodell (Zimmer *et al.*, 2000) von Interesse. Für eine gute Vorhersage der Isoprenemission ist eine gute Vorhersage des Triosephosphatgates notwendig. Im gleichen Zusammenhang ist auch der NADPH-Gehalt von Interesse, der ein wichtiger Faktor der chloroplastidären Isoprenbiosynthese ist.

Wird das erweiterte Modell der Blattphotosynthese an ein Modell der Isoprenbiosynthese gekoppelt, so sind noch folgende Änderungen zu beachten:

- Der konstante Metabolit-*pool* für cytosolisches Triosephosphat (TP^c) muss als variable Größe in das Modell aufgenommen werden.
- Es muss ein weiterer NADPH verbrauchender Reaktionsschritt berücksichtigt werden.

Betrachtet man die Ergebnisse der Simulation am 10.08.2000, so kann leider wegen der fehlenden Datendichte der Messwerte keine Aussage getroffen werden, ob die Tagesverläufe auch der Realität an diesem Tag nahe kommen. Allerdings kann man feststellen, dass die simulierten Werte im Bereich der gemessenen Werte und den von Giersch *et al.* (1990) und Lawlor (1990) publizierten Werten bleiben.

Wenn alle aus dem BEWA 2000 Projekt entstandenen Messdaten zur Verfügung stehen, können die Modellparameter für Pappeln (*Populus sp.*) und Steineichen (*Quercus ilex*) erhoben werden. Mit diesen können dann weitere Untersu-

chungen und Vergleiche zwischen den Spezies durchgeführt werden. Untersuchungen mit jahreszeitlichen Variationen einzelner Modellparameter und Vergleich dieser Ergebnisse mit Messdaten sind ebenfalls für die Zukunft geplant.

Tabelle 7.2: Die Parameter des erweiterten Modells. Der überwiegende Teil der Parameter wurde aus Giersch *et al.* (1990) übernommen. Für einige Parameter wurden empirisch Werte bestimmt, damit die modellierten Metabolitgehalte mit gemessenen Werten im gleichen Bereich liegen (V_{m2} , V_{m3} , V_{m4}). Die Parameter zur Bestimmung der Carboxylierungsrate (V_{cmx} , V_{c0} , α_R , θ_R) wurden aus Kirschbaum *et al.* (1998) entnommen und an die Einheiten des vorliegenden Modells angepasst.

Parameter	Wert	Einheit	Parameter	Wert	Einheit
J_{max}	6.0	mM s ⁻¹	V_{m3}	0.725	mM s ⁻¹
α_J	0.77	mM	k_{m3}	0.4	mM
θ_J	0.67	–	V_{m4}	3.81	mM s ⁻¹
V_{cmx}	40.0	mM	k_{m41}	0.05	mM
V_{c0}	6.4	mM	k_{m42}	0.5	mM
α_R	1.6	mM	k_{m43}	0.05	mM
θ_R	0	–	V_{m5}	3.3	mM s ⁻¹
k_a	10.0	$\mu\text{mol mol}^{-1}$	k_{m53}	0.08	mM
k_c	310.0	$\mu\text{mol mol}^{-1}$	k_{m55}	0.25	mM
k_o	155.0	mmol mol ⁻¹	P_i^c	1.4	mM
o_i	210.0	mmol mol ⁻¹	TP^c	0.2	mM
k_r	1.0	mM	k_{m61}	0.08	mM
V_{m2}	2.49	mM s ⁻¹	k_{m62}	0.5	mM
k_{m21}	1.0	mM	V_{m7}	0.4	mM s ⁻¹
k_{m22}	1.0	mM	k_{m7}	0.02	mM
k_e	14.0	mM	κ	0.1	–
			λ	0.1	–

Kapitel 8

Zusammenfassung

Die Vorhersage biogener Isoprenemissionen mittels eines prozessorientierten Emissionsmodells erfordert die möglichst genaue mathematische Beschreibung der zugrunde liegenden physiologischen Prozesse. In dieser Arbeit wurde ein mathematisches Modell der Blattphotosynthese entwickelt, das sowohl die Regulation der Blattleitfähigkeit durch Umweltfaktoren wie Licht, Temperatur und Luftfeuchte betrachtet als auch die vom Licht und der Temperatur abhängige CO_2 -Fixierung beinhaltet.

Es wurde zunächst eine Übersicht über die möglichen Ausprägungen von Photosynthesemodellen gegeben. Dabei wurden auch die unverzichtbaren Bausteine der Photosynthesemodelle thematisiert und eine Klasseneinteilung der Modelle vorgenommen. Anschließend wurde die Blattphotosynthese auf theoretischer Grundlage beschrieben. Insbesondere führt die theoretische Beschreibung des Gaswechsels auf eine allgemeine Formulierung eines Blattphotosynthesemodells mit physikochemischen Wurzeln. Da die Photosynthese jedoch auch aus dem biochemischen Blickwinkel der CO_2 -Fixierung im Calvin-Zyklus betrachtet werden kann, entsteht das „ c_i -Dilemma“ – man kann die Assimilationsrate auf zwei Wegen bestimmen, die nicht notwendigerweise denselben Wert liefern.

Die Lösung dieses Dilemmas führt nun zur Formulierung eines prozessori-

entierten Blattphotosynthesemodells, das die zugrundeliegenden Prozesse in drei Subsystemen abbildet. (1) Die Blattleitfähigkeit, die über Umweltfaktoren (Licht, Temperatur, Luftfeuchte) gesteuert wird, (2) die CO_2 -Aufnahme über ein *source-sink*-Mechanismus des intrazellulären CO_2 -Speichers und (3) die biochemische CO_2 -Fixierung im Calvin-Zyklus und der Export von Triosephosphaten aus den Chloroplasten.

Für das erste Subsystem, die Blattleitfähigkeit, wurde eine Steuerfunktion $G(I, VPD)$ abgeleitet, die den Gleichgewichtswert der Blattleitfähigkeit bezüglich des Lichts (I) und des Wasserdampfdruckdefizits (VPD) zwischen Blatt und Umgebung charakterisiert. Ausgehend von einem nach Kirschbaum *et al.* (1988) modifizierten Modell mit drei Variablen wurde ein einfacheres Modell mit einer Variablen entwickelt und diese dann verglichen. Es konnte dabei kein signifikanter Unterschied zwischen den beiden Ansätzen festgestellt werden. Weiter wurde untersucht, welchen Einfluss die Verknüpfung der Steuergrößen (multiplikativ oder minimal) auf die Blattleitfähigkeit besitzt. Für das vorgestellte Modell war der minimale Ansatz für die Steuerfunktion $G(I, VPD)$ besser geeignet die gegebenen Messdaten der Blattleitfähigkeit zu approximieren.

Zur Überprüfung der Strukturgültigkeit des neu formulierten Modells der Blattphotosynthese wurde ein Skelettmodell mit drei Variablen (g_s , p_i und a_{ps}) untersucht. Im Vergleich mit den Messdaten liefert das Skelettmodell eine sehr gute Übereinstimmung bei der Assimilationsrate A und der Blattleitfähigkeit g_s . Die intrazelluläre CO_2 -Konzentration wurde in den meisten Fällen leicht überschätzt und in einem Fall relativ stark unterschätzt. Die leichte Überschätzung deutet darauf hin, dass die sehr einfach gewählte Carboxylierungsreaktion des Skelettmodells nicht alle wichtigen Aspekte des realen Systems berücksichtigt. Insgesamt zeigen die simulierten Ergebnisse der fünf Tagesgänge, dass die Modellstruktur die typische Dynamik der Photosynthese im Tagesverlauf wiedergibt und somit eine gute Approximation der Blattphotosynthese ist. Ein überraschendes Ergebnis ist, dass es mit der Variation von nur drei Parametern möglich ist, alle fünf Tage zu

simulieren. Die Variation der Parameter lässt sich zudem aus den klimatischen Gegebenheiten während der Messtage erklären.

Das Skelettmodell wurde mit einem Modell des Calvin-Zyklus erweitert, welches als Intermediate RuBP, PGA, Triosephosphat, P_i , Ru5P, ATP/ADP und NADPH/NADP berücksichtigt. Dabei wurden die von Farquhar *et al.* (1980) beschriebenen Limitierungen der Assimilationsrate durch CO_2 und RuBP berücksichtigt. Das Modell berücksichtigt ebenfalls die temperaturabhängige Konkurrenz der Carboxylierungsrate zur Oxygenierungsrate der Rubisco. Der nach Giersch *et. al* (1990) modellierte Phosphattranslokator lässt bezüglich der Isoprensynthese eine Unterscheidung zwischen den chloroplastidären und cytosolischen Triosephosphat-*pools* zu und ermöglicht es somit zwischen dem DOXP- und dem Mevalonatweg zu unterscheiden.

Kapitel 9

Anhang

9.1 Informationen zu den verwendeten numerischen Lösungsalgorithmen

Im Verlauf dieser Arbeit wurden verschiedene numerische Lösungsalgorithmen verwendet. Nach anfänglichen Versuchen mit einem 4-Schritt Runge-Kutta-Verfahren mit adaptiver Schrittweitensteuerung wurde dieser in C++ geschriebene Algorithmus durch einen im Internet verfügbaren Standardlösungsalgorithmus abgelöst. Dieser, CVODE, ist eine in C geschriebene Bibliothek und über die Webseite¹ des Lawrence Livermore National Laboratory verfügbar. Die Entscheidung für diesen Lösungsalgorithmus war aus zwei Gründen motiviert. Zum einen war die Interoperabilität im Projektverbund (BEWA 2000) zu sichern. Wegen der beiden im Verbund verwendeten Computersprachen C und FORTRAN fiel die Wahl auf eine C-Bibliothek. Zum anderen hatten Versuche mit dem Runge-Kutta-Verfahren ergeben, dass es ein schlechteres Laufzeitverhalten als CVODE aufweist. Zudem wäre eine Neuimplementierung in C notwendig geworden mit anschließender Validierungsphase, was einen relativ großen Zeitverlust bedeutet hätte.

¹<http://www.llnl.gov/CASC/sundials/>

Im Zuge einer personellen Neubesetzung im Jahr 2003 wurde entschieden, dass das gekoppelte Blattphotosynthese-Isoprenemissions-Modell in C++ neu implementiert werden soll. Dies hat letztlich dazu geführt, dass eine weitere Bibliothek verwendet wurde. Diese, von Roussel und Roussel (2003) vorgestellte Bibliothek implementiert den GEAR-Algorithmus mit einer Ordnung von 4 und adaptiver Schrittweitensteuerung als C++ Klasse. Dieser Algorithmus wird bislang allerdings nur in der *stand-alone* Version des gekoppelten Photosynthese-Isoprenemissionsmodells verwendet und ist noch nicht mit den FORTRAN Modulen der luftchemischen Bestandsmodelle und dem Regionalmodell gekoppelt.

9.1.1 Der CVODE Lösungsalgorithmus

Die CVODE Bibliothek verwendet ein sogenanntes lineares Mehrschrittverfahren zum Lösen des Differentialgleichungssystems $\dot{y} = f(t, y)$. Dabei kommen die Adams-Moulton- und BDF²-Methode mit variablen Koeffizienten zur Anwendung. Da im Falle des Blattphotosynthesemodells sehr große Unterschiede bei den Zeitkonstanten auftreten³, verwende ich die für „steife Systeme“ vorgesehene BDF-Methode als Lösungsalgorithmus. Damit erhält man das lineare Mehrschrittverfahren

$$\sum_{i=0}^{K_1} \alpha_{n,i} y_{n-i} + h_n \sum_{i=0}^{K_2} \beta_{n,i} \dot{y}_{n-i} = 0 \quad (9.1)$$

zum Berechnen von y_n zum Zeitpunkt t_n . Die \dot{y}_n sind die berechneten Approximationen zu $\dot{y}(t_n)$, $h_n = t_n - t_{n-1}$ ist die Schrittweite und $\alpha_{n,0} = -1$. Für die BDF-Methode gilt, dass die Ordnung über $K_1 \in [1, 2, 3, 4, 5]$ eingestellt wird und $K_2 = 0$ ist. Es muss nun das nichtlineare System

²*backward differentiation formula.*

³Die Blattleitfähigkeit variiert im Bereich von mehreren Minuten bis zu einer halben Stunde, während die Transienten bei den biochemischen Reaktionen des Calvin-Zyklus im Millisekundenbereich liegen.

$$G(y_n) \equiv y_n - h_n \beta_{n,0} f(t_n, y_n) - a_n \quad (9.2)$$

mit

$$a_n \equiv \sum_{i>0} a_{n,i} y_{n-i} + h_n \beta_{n,i} \dot{y}_{n-i} \quad (9.3)$$

gelöst werden. Im Falle der BDF-Methode wird dies über eine Newton-Iteration realisiert. Dieses Iterationsverfahren löst das lineare System der Form

$$M[y_{n(m+1)} - y_{n(m)}] = -G(y_{n(m)}), \quad (9.4)$$

wobei M eine Approximation der Newton Matrix $I - h\beta_{n,0}J$ ist. $J = \partial f / \partial y$ ist dabei die Jacobi-Matrix. Für die Lösung eines Differentialgleichungssystems mit der CVODE Bibliothek wird neben den Gleichungen des Systems $\dot{y} = f(t, y)$ auch noch die Information über die Jacobi-Matrix benötigt. Je nach Komplexität des Systems kann es sinnvoll sein, diese Ableitungen „von Hand“ zu berechnen und dem Lösungsalgorithmus zur Verfügung zu stellen. Speziell für dünn besetzte Systeme und solche mit nahezu Diagonalform macht dies Sinn. Ist die Systemmatrix jedoch dicht besetzt und das System mit vielen Gleichungen bestückt, so kann es sinnvoll sein, die Jacobi-Matrix numerisch zu berechnen. Dies geht allerdings nur auf Kosten einer erhöhten Rechenzeit.

9.1.2 Fehlergrenzen des CVODE Algorithmus

Die Abschätzung und Kontrolle der Approximationsfehler ist eine wichtige Eigenschaft des Lösungsalgorithmus. Im Falle von CVODE werden die lokalen Rundungsfehler abgeschätzt und mit gegebenen absoluten und relativen Fehlertoleranzwerten verglichen. Der lokale Fehlertest gilt als bestanden, wenn alle Komponenten des Fehlervektors $|e_i|$ kleiner oder gleich der gegebenen absoluten Toleranzschwelle $ATOL_i$ sind oder der relative Fehler $|e_i|/|y_i|$ kleiner oder gleich der relativen Fehlertoleranz $RTOL$ ist.

Für die Blattphotosynthesemodelle (Skelettmodell und erweitertes Modell) wurden die Toleranzwerte $ATOL_i$ und $RTOL$ zahlenmässig gleich gewählt. Ein Wert von 10^{-4} hat sich bei allen Simulationsläufen als ausreichend erwiesen.

9.2 Fehlerabschätzung bei der Verwendung kubischer Splines als Eingangsdaten

Aus schon genannten Gründen werden die Eingangsdaten für Licht, Temperatur und Taupunkttemperatur als kubische Splines vorgehalten. An dieser Stelle möchte ich eine Abschätzung liefern, in welchem Rahmen sich die Fehler bewegen können und ob diese einen bemerkbaren Einfluss auf die Ergebnisse der Simulationen haben können.

Angenommen $\Delta_k := \{a = x_0 < x_1 < \dots < x_{k-1} < x_k = b\}$ sei eine Zerlegung des Intervalls $[a, b] \in \mathcal{R}$ und es existiert eine Splinefunktion $s(x) : [a, b] \rightarrow \mathcal{R}$ und eine Funktion $f(x)$, die in $[a, b]$ total stetig ist und $h = (b - a)/(k + 1)$ dann gilt:

$$\|f^{(\nu)} - s^{(\nu)}\|_{\infty} \leq \left(\frac{h}{\pi}\right)^{4-\nu} \|f^{(4)}\|_{\infty} \text{ für } \nu = 0, 1, 2, 3. \quad (9.5)$$

Diese Ungleichung besagt, dass der Fehler durch die Wahl einer Splinefunktion $s(x)$ unterhalb einer bestimmten Grenze (rechte Seite der Ungleichung) bleibt. Es gilt weiter,

$$s(x) = \sum_{i=0}^k f_i s_i(x) \quad (9.6)$$

und damit ist der Spline von der Anzahl k der verwendeten Intervalle anhängig.

Die Eingangsdaten haben eine Sampling-Rate⁴ von $1/3 \text{ min}^{-1}$ über eine Messperiode von 24 h (1440 min). Daraus errechnet sich mit $h = 24/481 = 0.05$ und

⁴Für zeitlich äquidistante Messungen mit einem Abstand T bezeichnet $1/T = r$ die *Sampling-Rate* (Hütt, 2001).

$\nu = 0$ bei äquidistanter Verteilung der Messpunkte in Gleichung 9.5 die Grenze zu

$$\left(\frac{0.05}{\pi}\right)^4 C_4 = 6.376 \cdot 10^{-8} C_4 \text{ mit } C_4 := \|f^{(4)}\|_{\infty}. \quad (9.7)$$

Da C_4 aus den Differenzen der Messwerte errechnet wird, und diese im extremsten Fall beim Licht eine Wertespanne von etwa $1.5 \cdot 10^3$ abdecken, ist auf alle Fälle der Fehler durch Verwenden der Splinefunktionen kleiner als 10^{-4} .

9.3 Hinweise zu den verwendeten Messdatensätzen

Diese Arbeit ist im Rahmen des Deutschen Atmosphären-Forschungsprogrammes (AFO 2000) entstanden. Die Arbeitsgruppe Giersch des Instituts für Botanik der TU-Darmstadt war Teilnehmer im Bereich Modellierung am AFO-Teilprojekt BEWA 2000. Die Arbeitsgruppe um Dr. Jörg-Peter Schnitzler vom Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Bereich Atmosphärische Umweltforschung (IMK-IFU) in Garmisch-Partenkirchen hat im Projektverbund die Isoprenemissionsmessungen sowie die Gaswechsellmessungen auf dem Wank (1780 m üNN.) in durchgeführt (vgl. Methoden in Zimmer *et al.* 2000). Die Untersuchung und Messung der Metabolitgehalte wurde vom Projektpartner AG Prof. Dr. Hampp, Physiologische Ökologie der Pflanzen in Tübingen durchgeführt (vgl. Bauknecht, 2001). Weitere Daten, etwa die Zuckergehalte, wurden von Dr. Jürgen Kreuzwieser, Professur für Baumphysiologie (CTP) der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, beigesteuert.

Es sind im Projektverlauf Messdaten bis ins Jahr 2003 erhoben worden. Allerdings liegen für die Jahre 2002 und 2003 bislang keine Daten zu den Metaboliten und Zuckern vor. Die Gaswechsellmessdaten des Jahres 2001 wurden an *Populus sp.* erhoben und ab 2002 an *Quercus ilex*. Diese Änderung der Spezies bedingt

natürlich auch eine veränderte Parametrisierung des Modells. Daher habe ich mich entschieden, im Rahmen dieser Arbeit die Datensätze zu verwenden, für die eine komplette Parametrisierung möglich ist. Diese Datensätze wurden in den Jahren 1999 bis 2000 an *Quercus robur* erhoben.

Mit weiterem Datenmaterial, speziell zu den Metabolit- und Zuckergehalten, können die Modellparameter an diese Datensätze angepasst werden und so die Anzahl der simulierbaren Spezies erhöht werden.

Literaturverzeichnis

- [1] Atkins, P.W. *Physical Chemistry*. Oxford University Press, Oxford, fifth edition, 1995.
- [2] Ball, J.T. *Stomatal Function*. Eds. Zeiger, E., Farquhar, G.D. and Cowan, I.R., Kapitel - Calculations related to gas exchange. pp. 445-476, Stanford University Press, 1987.
- [3] Bauknecht, N.M. *Untersuchung der Zusammenhänge zwischen Isoprenbiosynthese und Kohlenhydratstoffwechsel unter verschiedenen Umweltbedingungen*. Dissertation, Eberhard Karls Universität Tübingen, 2001.
- [4] Bossel, H. *Simulation dynamischer Systeme*. Vieweg Verlag, Braunschweig, Wiesbaden, 2. verb. Auflage, 1992.
- [5] Cohen, S.D. and Hindmarsh, A.C. *CVODE User Guide*. Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, 1994. UCRL-MA-118618.
- [6] Dang, Q.-L., Margolis, H.A., and Collatz, J. Parametrization and testing of a coupled photosynthesis-stomatal conductance model for boreal trees. *Tree Physiology*, (18):141–153, 1998.
- [7] Evans, J.R. and v. Caemmerer, S. Carbon dioxide diffusion inside leaves. *Plant Physiology*, (110):339–346, 1996.
- [8] Farquahr, G.D., Dubbe, D.S., and Raschke, K. Gain of the feedback loop involving carbon dioxide and stomata. *Plant Physiology*, (62):406–412, 1978.

- [9] Farquahr, G.D. and Sharkey, T.D. Stomatal conductance and photosynthesis. *Annual Review of Plant Physiology*, (33):317–345, 1982.
- [10] Farquahr, G.D., v. Caemmerer, S., and Berry, J.A. A biochemical model of photosynthetic CO₂ assimilation in leaves of C₃ species. *Planta*, (149):78–90, 1980.
- [11] Finck v. Finckenstein, K. *Einführung in die Numerische Mathematik Bd. 1*. Carl Hanser Verlag, München, Wien, 1977.
- [12] Finck v. Finckenstein, K. *Einführung in die Numerische Mathematik*. Selbstverlag, Darmstadt, 1992. Vorlesungsausarbeitung zum Sommersemester 1992.
- [13] Giersch, C. Mathematical modelling of metabolism. *Current Opinion in Plant Biology*, (3):249–253, 2000.
- [14] Giersch, C., Lämmel, D., and Farquhar, G.D. Control analysis of photosynthetic CO₂ fixation. *Photosynthesis Research*, (24):151–165, 1990.
- [15] Grams, T. *Simulation*. BI Wissenschafts Verlag, Mannheim, Leipzig, Wien, Zürich, 1992.
- [16] Gross, L.J., Kirschbaum, M.U.F., and Pearcy, R.W. A dynamical model of photosynthesis in varying light taking account of stomatal conductance, C₃-cycle intermediates, photorespiration and Rubisco activation. *Plant, Cell and Environment*, (14):881–893, 1991.
- [17] Guenther, A., Hewitt, C.N., Erickson, D, Fall. R., Geron, C., Graedel, T., Harley, P., Klinger, L., Lerdau, M, McKay, W.A., Pierce, T, Scholes, B., Steinbrecher, R., Tallamraju, R., Taylor, J., and Zimmermann, P. A global model of natural volatile organic compound emissions. *J. Geophys. Res.*, (100):8873–8892, 1995.

- [18] Guenther, A., Zimmermann, P., Harley, P., Monson, R.K., and Fall, R. Isoprene and monoterpene emission rate variability: model evaluation and sensitivity analysis. *J. Geophys. Res.*, (98):12609–12617, 1993.
- [19] Hahn, B.D. A mathematical model of the calvin cycle: Analysis of the steady state. *Annals of Botany*, (57):639–653, 1986.
- [20] Harley, P.C., Monson, R.K., and Lerda, M.T. Ecological and evolutionary aspects of isoprene emission from plants. *Oecologia*, (118):109–123, 1999.
- [21] Harley, P.C., Weber, J.A., and Gates, D.M. Interactive effects of light, leaf temperature, CO₂ and O₂ on photosynthesis in soybean. *Planta*, (165):249–263, 1995.
- [22] Hämmerlein, G. and Hoffmann, K.-H. *Numerische Mathematik*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1992.
- [23] Hütt, M.-T. *Datenanalyse in der Biologie*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2001.
- [24] Jarvis, A.J. and Davies, W.J. The coupled response of stomatal conductance to photosynthesis and transpiration. *Journal of Experimental Botany*, (49):399–406, 1998.
- [25] Jarvis, P.G. The interpretation of the variations in leaf water potential and stomatal conductance found in canopies and in the field. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series B- Biological Sciences*, (237):593–610, 1976.
- [26] Katul, G.G., Ellsworth, D.S., and Lai, C.-T. Modelling assimilation and intercellular CO₂ from measured conductance: a synthesis of approaches. *Plant, Cell and Environment*, (23):1313–1326, 2000.

- [27] Kiehl, M. *Mathematische Modellierung*. Selbstverlag, Darmstadt, 2004. Vorlesungsausarbeitung zum Sommersemester 2004.
- [28] Kirschbaum, M.U.F., Gross, L.J., and Percy, R.W. Observed and modelled stomatal responses to dynamic light environments in the shade plant *Alocasia macrorrhiza*. *Plant, Cell and Environment*, (11):111–121, 1988.
- [29] Kirschbaum, M.U.F., Küppers, M., Schneider, H., Giersch, C., and Noe, S. Modelling photosynthesis in fluctuating light with inclusion of stomatal conductance, biochemical activation and pools of key photosynthetic intermediates. *Planta*, (204):16–26, 1998.
- [30] Kreuzwieser, J., Graus, M., Wisthaler, A., Hansel, A., Rennenberg, H., and Schnitzler, J.-P. Xylem-transported glucose as an additional carbon source for leaf isoprene formation in *Quercus robur*. *New Phytologist*, (156):171–178, 2002.
- [31] Laisk, A. and Eichelmann, H. Towards understanding oscillations: a mathematical model of the biochemistry of photosynthesis. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, B 323:369–384, 1989.
- [32] Lambers, H., Chapin III, F.S., and Pons, T.L. *Plant Physiological Ecology*. Springer, New York, 1998.
- [33] LANL scientists, Petzold, L.R., Sherman, A. H., et al. LSODE solver family. WWW, Free Fortran Library. <http://www.netlib.org/odepack/index.html>.
- [34] Lawlor, D.W. *Photosynthese: Metabolismus – Kontrolle – Physiologie*. Thieme Verlag, Stuttgart, 1990.
- [35] Leuning, R. A critical appraisal of a combined stomatal-photosynthesis model for C_3 plants. *Plant, Cell and Environment*, (18):339–355, 1995.

- [36] Lichtenthaler, H.K., Rhomer, M., and Schwender, J. Two independent pathways for isopentenyl diphosphate and isoprenoid biosynthesis in plants. *Physiologia Plantarum*, (101):543–652, 1997.
- [37] Logan, B.A., Monson, R.K., and Potosnak, M.J. Biochemistry and physiology of foliar isoprene production. *Trends in Plant Science*, 5(11):477–481, 2000.
- [38] Lösch, R. *Wasserhaushalt der Pflanzen*. Quelle und Meyer, Wiebelsheim, 2001.
- [39] Marquardt, D. An algorithm for least-squares estimation of non-linear parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, (12):591–612, 1963.
- [40] Martin, M.J., Stirling, C.M., Humphries, S.W., and Long, S.P. A process-based model to predict the effects of climatic change on leaf isoprene emission rates. *Ecological Modelling*, (131):161–174, 2000.
- [41] Mohr, H. and Schopfer, P. *Pflanzenphysiologie*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, vierte Auflage, 1992.
- [42] Morgan, J.A. and Rhodes, D. Mathematical modeling of plant metabolic pathways. *Metabolic Engineering*, (4):80–89, 2001.
- [43] Niinemets, Ü., Reichstein, M., Staudt, M., Seufert, G., and Tenhunen, J.D. Stomatal constraints may affect emission of oxygenated monoterpenoids from the foliage of *Pinus pinea*. *Plant Physiology*, (130):1371–1385, 2002b.
- [44] Niinemets, Ü., Seufert, G., Steinbrecher, R., and Tenhunen, J.D. A model coupling foliar monoterpene emissions to leaf photosynthetic characteristics in mediterranean evergreen *Quercus* species. *New Phytologist*, (153):257–275, 2002a.

- [45] Niinemets, Ü., Tenhunen, J.D., Harley, P.C, and Steinbrecher, R. A model of isoprene emission based on energetic requirements for isoprene synthesis and leaf photosynthetic properties for *Liquidambar* and *Quercus*. *Plant, Cell and Environment*, (22):1319–1336, 1999.
- [46] Noe, S.M. *Untersuchung eines Modells der Blattphotosynthese: Analyse, mathematische Charakterisierung und Erweiterungen*. Diplomarbeit, Technische Universität Darmstadt, 2000.
- [47] Noe, S.M. and Giersch, C. A simple dynamic model of leaf photosynthesis: Coupling leaf conductance and photosynthetic carbon fixation by a variable intracellular CO₂ pool. *Functional Plant Biology*, (submitted), 2004.
- [48] Pearcy, R.W., Gross, L.J., and He, D. An improved dynamic model of photosynthesis for estimation of carbon gain in sunfleck light regimes. *Plant, Cell and Environment*, (20):411–424, 1997.
- [49] Roussel, C.J. and Roussel, M.R. Generic object-oriented differential equation integrators. *C/C++ Users Journal*, (11):18–23, 2003.
- [50] Schultz, H.R. and Matthews, M.A. High vapour pressure deficit exacerbate xylem cavitation and photoinhibition in shade-grown *Piper auritum* H.B. & K. during prolonged sunflecks: I) relations of plant water relations. *Oecologia*, (110):312–319, 1997.
- [51] Singsaas, E.L. and Sharkey, T.D. The effects of high temperature on isoprene synthesis in oak leaves. *Plant, Cell and Environment*, (23):751–757, 2000.
- [52] Sitte, P., Ziegler, H., Ehrendorfer, H, and Bresinsky, A. *Strasburger – Lehrbuch der Botanik*. Gustav Fischer Verlag, Stuttgart, 1993.
- [53] Snaith, P.J. and Mansfield, T.A. Responses of stomata to iaa and fusicoccin at the opposite phases of an entrained rhythm. *Journal of Experimental Botany*, (36):937–944, 1985.

- [54] Snaith, P.J. and Mansfield, T.A. The circadian rhythm of stomatal opening: evidence for the involvement of potassium and chloride fluxes. *Journal of Experimental Botany*, (37):188–199, 1986.
- [55] Stöcker, H. *Taschenbuch der Physik*. Verlag Harry Deutsch, Thun, Frankfurt am Main, 1994.
- [56] Thornley, J.H.M. and Johnson, I.R. *Plant and Crop Modelling: A Mathematical Approach to Plant and Crop Physiology*. Oxford University Press, Oxford, 1990.
- [57] Streubing, L. und Fangmeier, A. *Pflanzenökologisches Praktikum*. Ulmer, Stuttgart, 1992.
- [58] v. Caemmerer, S. and Farquahr, G.D. Some relationships between the biochemistry of photosynthesis and the gas exchange of leaves. *Planta*, (153):376–387, 1981.
- [59] v. Willert, D.J., Matyssek, R., and Herppich, W. *Experimentelle Pflanzenökologie*. Thieme Verlag, Stuttgart, 1995.
- [60] Wong, S.C., Cowan, I.R., and Farquhar, G.D. Stomatal conductance correlates with photosynthetic capacity. *Nature*, (282):424–426, 1979.
- [61] Yong, J.W.H. and Farquahr, G.D. Stomatal responses to changes in vapour pressure difference between leaf and air. *Plant, Cell and Environment*, (20):1213–1216, 1997.
- [62] Zeiger, E. and Zhu, J. Role of zeaxanthin in blue light photoreception and the modulation of light-CO₂ interactions in guard cells. *Journal of Experimental Botany*, (49):433–442, 1998.

- [63] Zimmer, W., Brüggemann, N., Emeis, S., Giersch, C., Lehning, A., Steinbrecher, R., and Schnitzler, J-P. Process-based modelling of isoprene emission by oak leaves. *Plant, Cell and Environment*, (23):585–595, 2000.

Kapitel 10

Anlagen

Lebenslauf

von Steffen Manfred Noe, geb. 10.08.1966 in Mannheim, verheiratet, eine Tochter

Schule

1970 - 1974	Grundschule in Laudenbach
1974 - 1986	Gymnasium der Geschwister-Scholl-Schule in Bensheim

Dienste und Praktika

1986	Industriepraktikum
1987 - 1988	Grundwehrdienst

Studium

1988 - 1990	Studium der Nachrichtentechnik an der FH Mannheim
1990 - 1994	Studium der Mathematik an der TU Darmstadt
1994 - 1999	Studium der Biologie an der TU Darmstadt
Jan. 2000 -	Diplomarbeit zum Thema:
Jul. 2000	„Untersuchung eines Modells der Blattphotosynthese: Analyse, mathematische Charakterisierung und Erweiterungen“ am Institut für Botanik der TU-Darmstadt

Dissertation

März 2001 -	Thema: „Entwicklung eines mathematischen Modells
Mai 2004	der Blattphotosynthese als Teil einer prozessorientierten Simulation der Isoprenemission“ am Institut für Botanik der TU-Darmstadt

Publikationen

Manuskript

Noe, S.M. and Giersch, C., A simple dynamic model of leaf photosynthesis: Coupling leaf conductance and photosynthetic carbon fixation by a variable intracellular CO₂ pool. *Functional Plant Biology*, (submitted), 2004

Poster

A process-based model of C₃-photosynthesis: Simulation of isoprene emission in oak leaves.

Botaniker Tagung: Freiburg (2002)

Elements of a process-based model of leaf photosynthesis.

AGU Fall: Los Angeles (2003)

Development of a mathematical model of photosynthesis as part of a process-based simulation of isoprene emission.

Gordon Research Conference: Biogenic hydrocarbons, Il Ciocco (IT) (2004)

Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die vorliegende
Dissertation selbstständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln
angefertigt habe.

Laudenbach, 19.05.2004